

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
ENGENHARIA MECÂNICA**

**MODELO DE BOLTZMANN BASEADO EM MEDIADORES DE CAMPO PARA  
FLUIDOS IMISCÍVEIS**

**Tese submetida à**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA**

**para a obtenção do grau de**

**DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**PAULO CESAR FACIN**

**Florianópolis, setembro de 2003.**

**Ter o livre arbítrio significa acreditar  
no que quiser.**

**Aos animais.**

**Ao meu amigo, o Véio.**

## AGRADECIMENTOS

A Deus pela oportunidade dessa existência.

A minha família por todas as orações para que minha existência fosse boa.

A Andresa, pelo amor, pelo companheirismo, pelo exemplo.

A aqueles que viveram comigo sob o mesmo teto e me deram amor: Andresa, Hilda, Lix, Kriska, Esmilei, Murisco, Buyu Murisco, Branca, Amarela, Petruquio, Cabeça, Ninico, Buyzinho Macho, Buyu, Mário, Cláudia, Jacaré, Heracto, Poodle, Juca, Boris, Juju, Filó, Rejane.

Ao Philippi, pela oportunidade no LMPT, pela paciência, pela ajuda, por bons momentos em Florianópolis e até em Petrópolis.

Ao Emerich, pela amizade, pela ajuda, por dividir não só comigo, mas com todo o LMPT suas interpretações do mundo.

Aos amigos Hegele, Fabiano, André Bueno, Surmas, Sávio, Damiani, Celsão, Brasilis, Diego, Montóia, Jaison, Saulo, Bellini, Geziel, Alexandre, Rafael, Sato, Paulista, Gaspari, Paghi, Marcelom, Zé Mateli, Baiano, André, Bruxo, Fernanda, Ivan, pelos bons momentos que dividimos em ambiente de trabalho e fora dele.

Aos colegas do DEFIS pelo apoio e confiança na minha saída para o doutorado, em especial ao amigo Luiz Bastos Bernardes pela mão amiga e ao prof. Posadas que me apresentou ao LMPT.

O doutorado faz parte da vida, das outras partes também recebi ajuda, carinho e amizade, obrigado Marcão, Fabrini, Taba, Fino, Magro da Luz, Flávia, Luan, Marcelo, Ana, Maurão, Cris, Solange, Elma, Edit, Lobo, Nero, Cláudio Dantas, Evelin.

A UFSC, a Capes, a UEPG, pela oportunidade de realizar o doutorado numa instituição renomada, com um ano de bolsa, com salário e liberação total das atividades docentes.



<b>CAPÍTULO 5 – Resultados da Análise de Chapman-Enskog</b>	<b>43</b>
<b>5.1 – Equações Macroscópicas</b>	<b>43</b>
<b>5.1.a – Fluidos Miscíveis</b>	<b>45</b>
<b>5.1.b – Fluidos Imiscíveis</b>	<b>48</b>
<b>Primeiro momento - Largura da Interface</b>	<b>49</b>
<b>Segundo momento – Quantidade de movimento</b>	<b>51</b>
<b>Pressão Normal</b>	<b>53</b>
<b>Tensão Interfacial</b>	<b>56</b>
<b>CAPÍTULO 6 – Resultados de Simulação</b>	<b>58</b>
<b>6.1 – Difusividade</b>	<b>58</b>
<b>6.2 – Viscosidade</b>	<b>63</b>
<b>6.3 – Pressão</b>	<b>66</b>
<b>6.4 – Largura da Interface</b>	<b>68</b>
<b>6.5 – Tensão Interfacial</b>	<b>71</b>
<b>CONCLUSÃO</b>	<b>75</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>77</b>
<b>Apêndice I</b>	<b>80</b>
<b>Apêndice II</b>	<b>88</b>

## SIMBOLOGIA

$\vec{X}$	posição discreta, de um sítio na rede
$\bar{x}$	posição contínua
$T$	passo de tempo discreto
$t$	tempo contínuo
$\vec{c}_i$	vetor velocidade discreta
$i$	indica uma direção na rede
$c$	módulo de $\vec{c}_i$
$b_m$	número de direções da rede para partículas em movimento
$b_r$	número de partículas em repouso
$N_i$	função distribuição de partículas
$N_i^{eq}$	função distribuição de partículas de equilíbrio
$R_i$	função distribuição de partículas do tipo R
$B_i$	função distribuição de partículas do tipo B
$\Omega_i$	operador de colisão da equação de Boltzmann para gases em rede
$\tau$	tempo de relaxação do operador de colisão
$\rho$	densidade de partículas
$\bar{u}$	velocidade macroscópica em unidades
$\bar{U}$	velocidade macroscópica em unidades físicas
$p$	pressão hidrostática
$D$	dimensão do espaço euclidiano
$k_n$	variável de macroscopização para espaço
$\tau^v$	tempo de relaxação para a viscosidade
$\tau^D$	tempo de relaxação para a difusividade
$\theta_i$	concentração relativa no modelo de Flekkøy
$M$	número de Mach
$c_s$	velocidade do som na rede

$D_0$	difusividade no modelo de Flekkøy
$\vec{f}$	gradiente de cor no modelo Gunstensen et al
$A$	intensidade de interação
$G$	função de Green
$D_{dif}$	difusividade no modelo de Shan e Chen
$w$	concentração relativa
$\vec{v}$	vetor velocidade macroscópico modificado pelos mediadores
$M_i$	função distribuição de mediadores
$h$	escala de comprimento
$t_c$	tempo característico macroscópico
$L$	comprimento característico macroscópico
$j^r$	corrente difusiva de massa do tipo R
$L$	Largura da interface
$\rho_{ini}$	densidade inicial
$\alpha, \beta, \delta$	quando usados como índices representam a notação de Einstein
$\delta$	escala de tempo
$\sigma$	tensão interfacial
$\pi$	fluxo de quantidade de movimento
$\varphi$	configurações de massa no modelo de Shan e Chen
$\varepsilon$	variável de macroscopização para o tempo
$\eta$	viscosidade cinemática

**LISTA DE FIGURAS**

Figura 2.1.1.a – Passo de colisão na rede hexagonal	6
Figura 2.1.1.b – Passo de propagação na rede hexagonal	6
Figura 2.1.2 – Rede FCHC	7
Figura 5.1.b.1 – Orientação da interface	52
Figura 6.1.1 – Condição inicial para medida de difusividade	57
Figura 6.1.2 – Patamar de difusividade	60
Figura 6.2.1 – Perfil parabólico de velocidades	64
Figura 6.3.1 – Pressões normal e tangencial	65
Figura 6.4.1 – Degradé para a interface	67
Figura 6.4.2 – Perfil de concentrações	67
Figura 6.4.3 - Perfil de concentrações	68
Figura 6.1.1 – Evolução temporal da tensão interfacial	70
Figura 6.1.2 – Evolução temporal da tensão interfacial	70
Figura 6.5.3 – Tensão interfacial contra o fator de interação	71
Figura 6.5.4 – Bolha de fluido para a medida de tensão interfacial	71
Figura 6.5.5 – Medida da tensão interfacial por Laplace	72
Figura 6.5.6 - Tensão interfacial contra o fator de interação por Laplace	73

## RESUMO

Neste trabalho é apresentado um modelo de Boltzmann baseado no conceito de mediadores de campo para a simulação de escoamentos bifásicos. Para que a difusividade da mistura seja controlada independentemente das viscosidades e ainda que estas viscosidades sejam independentes, propõe-se um operador de colisão do tipo BGK que admite três tempos de relaxação distintos, os quais dependem das concentrações relativas de cada fase. Os mediadores são usados para promover a separação das fases no caso imiscível. São obtidas as equações macroscópicas para o transporte de massa e quantidade de movimento, bem como expressões analíticas para os respectivos coeficientes de transporte: difusividade e viscosidade. Além disso, também é deduzida a largura da interface e tensão interfacial para fluidos imiscíveis. São apresentados resultados de simulação que confirmam a análise teórica.

**ABSTRACT**

In this work is presented a Lattice Boltzmann model based on the field mediator's concept intended to simulate two-phase flows. To obtain independent control of the diffusivity and the viscosities, a BGK collision operator is proposed in which three relaxation times dependent on the concentration are used. Field mediators are used to achieve the segregation of the immiscible fluids. Macroscopic equations describing the mass and momentum transport are deduced and, also, analytic expressions for the transport coefficients: diffusivity and viscosities. The interfacial region length is deduced in the case of a plane interface between the immiscible fluids. Simulation results are presented and confirm the results obtained in the theoretical analysis.

## CAPÍTULO 1 – Introdução

Neste trabalho é apresentado um modelo de Boltzmann para resolver numericamente escoamentos bifásicos. Nos escoamentos bifásicos duas espécies de partículas estão presentes, podendo-se ter duas situações limites: uma na qual as espécies estão totalmente *misturadas* e outra na qual as espécies estão totalmente *separadas*. Neste último caso, geralmente, para se resolver numericamente tais escoamentos, admite-se uma escala macroscópica para descrever a dinâmica dos fluidos, escala onde vale o limite hidrodinâmico e a densidade dos fluidos é considerada uma função contínua da posição, como no método de volumes finitos. Pode-se dizer que o método de volumes finitos quando aplicado a escoamentos bifásicos, “percebe” dois fluidos: um de cada lado de uma linha de separação, esta linha deve ser evoluída através de regras auxiliares à dinâmica dos fluidos. No presente trabalho a linha de separação torna-se uma região de separação entre as espécies, a qual possui uma dimensão característica que é a largura da interface e evolui naturalmente sem a necessidade de regras auxiliares. Nos modelos de Boltzmann o menor elemento de volume admite a possibilidade de se encontrar as duas espécies de partículas simultaneamente, esta coexistência define uma região de separação entre as espécies, ou seja, no que chamar-se-á interface de separação ou somente interface.

Considerando que a interface de separação entre as espécies, existe devido ao fato das interações entre as partículas de mesma espécie serem diferentes das interações entre partículas de espécies diferentes, montou-se um modelo de Boltzmann que leva em conta estas interações a nível mesoscópico. Consegue-se então descrever a região de separação entre as espécies como uma região comum aos dois tipos de partículas, onde ambas as fases coexistem. Variando-se um parâmetro do modelo, o qual é associado à intensidade da força exercida sobre uma partícula, pode-se ter uma mistura total dos fluidos (quando o parâmetro é nulo), ou então, uma mistura parcial dos fluidos, neste caso a região de mistura (interface) possui uma viscosidade diferente da viscosidade dos fluidos puros.

Na simulação numérica da equação de Boltzmann, variáveis do tipo “float” são manipuladas numa rede discreta. Quando é dado a estas variáveis um significado físico, a simulação pode passar a ter um significado físico. Nos modelos de Boltzmann ou LB (*Lattice Boltzmann*) o significado de tais variáveis é o de função distribuição de partículas, semelhante ao da Teoria Cinética dos Gases. Forçando ao máximo esta semelhança, pode-se usar a teoria cinética dos gases como um forte ponto de referência para a modelagem matemática dos fenômenos, físicos, na simulação. A expansão de Chapman-Enskog, muito usada na teoria

cinética, é a técnica usada neste trabalho para se obter as equações da dinâmica macroscópica do modelo. Os resultados desta análise são comparados com resultados de simulação.

Os modelos de Boltzmann, no contexto do CFD (*Computational Fluid Dynamics*) têm sido usados para simular equações diferenciais relacionadas aos processos envolvendo a dinâmica macroscópica dos fluidos, embora o nível mais baixo de descrição do modelo seja o nível mesoscópico. Ao se escolher regras de interações que imitem as interações de um sistema físico “real”, espera-se que o comportamento macroscópico do modelo seja semelhante ao comportamento macroscópico do sistema físico sob análise. Neste sentido, para imitar a física microscópica de uma interface de separação entre fluidos imiscíveis, admite-se que a interface é uma região onde as regras de interação para o modelo devem imitar, simultaneamente, colisões entre partículas de mesma espécie e entre partículas de espécies diferentes. Quando a interação de longo alcance é retirada do modelo os fluidos tornam-se completamente miscíveis.

Para fluidos miscíveis e fluidos imiscíveis existem alguns modelos de Boltzmann na literatura que simulam consistentemente as equações de transporte de massa e de quantidade de movimento. No modelo de Flekkøy [Flekkøy 1993] para fluidos miscíveis, a difusividade é independente da viscosidade, o que é muito vantajoso para a gama de possíveis fluidos a serem simulados, embora a difusividade dependa da velocidade. Os modelos de Gunstensen, Rothman, Zaleski e Zanetti [Gunstensen et al 1991], de Shan e Chen [Shan & Chen 1993] e sua extensão para três dimensões Martys e Chen [Martys & Chen 1996], desenvolvidos para fluidos imiscíveis simulam uma interface de separação consistente com a Lei de Laplace. Estes modelos seguem direções diferentes no processo de criação da interface; o primeiro usa regras alterando diretamente as distribuições de partículas do modelo e o segundo regras alterando as velocidades das partículas, das quais as distribuições de partículas dependem. Uma característica comum para estes modelos é a forma não-local como as interações são avaliadas.

Recentemente, trabalhos com modelos *booleanos* e de Boltzmann vêm sendo desenvolvidos para o estudo de escoamentos imiscíveis em meios porosos, motivados em grande parte por projetos envolvendo órgãos vinculados ao estudo e a exploração de petróleo. Neste caso, os fluidos geralmente são água e óleo, que possuem viscosidades bastante diferentes e com isso o modelo de Gunstensen e colaboradores não pode ser usado, o modelo de Shan e Chen apresenta difusividade dependente da viscosidade o que limita sua aplicação. Um modelo *booleano*, proposto por Santos e Philippi [Santos & Philippi 2002] para escoamentos bifásicos de fluidos imiscíveis, usa para a interação de longo alcance (muitos livre caminho médio) entre as partículas o conceito de mediadores do eletromagnetismo. Este conceito foi aplicado inicialmente

à quantização do campo eletromagnético, os fótons, que mediam as trocas de energia e de quantidade de movimento que ocorrem nas transições eletrônicas em sistemas atômicos. Baseado nessa idéia, os mediadores da interação entre as partículas do modelo *booleano* transportam a informação sobre a variação da quantidade de movimento que uma partícula poderá sofrer, depois de interagir com o mediador. No modelo de Santos & Philippi a quantidade de movimento transferida à partícula, devido à interação com os mediadores, age no sentido de separar os fluidos criando uma tensão interfacial entre as espécies. Uma forte característica desse modelo é que toda a informação necessária no processo de interação está no sítio, dispensando a etapa de consulta aos vizinhos dos modelos anteriores.

O modelo de Boltzmann proposto neste trabalho usa o conceito dos mediadores de Santos e Philippi para a interação a nível mesoscópico, onde as funções distribuição de partículas do modelo são influenciadas pelos mediadores de maneira a separar os fluidos. Como o objetivo do trabalho não era a simulação de escoamentos com transição de fases, os mediadores foram restritos a agir somente na região de separação entre os fluidos e o campo atrativo somente tem efeito nesta região. Conforme Gábor Házi e colaboradores [Házi et al., 2002], alguns modelos bifásicos usando o conceito de energia livre foram desenvolvidos apresentando transição de fases. O primeiro modelo, que conduziu a uma equação de estado consistente fisicamente, foi o de Swift e colaboradores [Swift et al (1995, 1996)], incluindo o funcional energia livre para dar consistência física ao modelo no caso de misturas de fluidos [Orlandini et al (1995)]. O transporte de energia nestes modelos não tem consistência física [Luo, 1998] e a equação do transporte de quantidade de movimento não possui invariância galileana [Ângelopoulos *et al.*, 1998]. O problema da invariância galileana foi amenizado mais tarde [Holdych *et al.*, 1998] e resolvido [Inamuro *et al.*, 2000 e Kalarakis *et al.* 2003]. Um outro problema destes modelos é não admitir viscosidades diferentes. Sofonea e Sekerka [Sofonea e Sekerka, 2001] tentaram dividir os operadores de colisão para duas espécies com tempos de relaxação diferentes, mas a conservação da quantidade de movimento local exige que os tempos de relaxação sejam iguais e com isso as viscosidades devem ser iguais.

O presente modelo proposto, apresenta um operador de colisão que admite três tempos de relaxação distintos, que dependem das concentrações: um para a viscosidade de uma das fases, um para a viscosidade da outra fase e um para a difusividade da mistura. A difusividade no caso de mistura total, depende apenas do tempo de relaxação para mistura, não sofrendo influência direta da velocidade como acontece no modelo de Flekkøy. Ainda no modelo proposto, o

processo de interação entre as partículas é local e tem como vantagem possibilitar o processamento paralelo do modelo.

Outros modelos consistentes do ponto de vista termodinâmico, embora não tenham sido escritos para fluidos imiscíveis ou miscíveis, são encontrados em: [Grosfils et al (1992)], [McNamara et al (1993)], [Alexander et al (1993)], [Chen et al (1993)], [Chen et al (1994)].

Neste trabalho, no capítulo 2, são apresentadas na seção (2.1) as idéias básicas dos modelos de Boltzmann monofásico e seus comportamentos mesoscópico e macroscópico. Na seção (2.2) é feita a distinção entre modelos bifásicos miscíveis e imiscíveis: na seção (2.2.1) é apresentado o modelo de Flekkøy para a simulação de fluidos miscíveis, na seção (2.2.2) apresentam-se dois modelos imiscíveis que foram ponto de partida para a criação de muitos outros modelos, o primeiro modelo é o de Gunstensen, Rothman, Zaleski e Zanetti na seção (2.2.2.a), o segundo é o modelo de Shan e Chen na seção (2.2.2.b).

No capítulo 3, apresenta-se a proposta de modelo bifásico que pode ser usado para a simulação de fluidos miscíveis ou imiscíveis, com difusividade independente da viscosidade e viscosidades diferentes para as fases puras. Na seção (3.1) apresenta-se a equação de evolução para a função distribuição de partículas e discute-se os operadores de colisão destas equações. Na seção (3.2) discute-se as distribuições de partículas de equilíbrio e a situação na qual a interface torna-se estável.

No capítulo 4 inicia-se a parte analítica matemática do modelo, que é a análise de Chapman-Enskog. Na seção 4.1 é feita a passagem para o nível macroscópico da evolução da função distribuição de partículas; na seção 4.2 são analisados os operadores de colisão do modelo e discutida a distribuição de equilíbrio da expansão de Chapman-Enskog. Na seção 4.3 faz-se uma análise das ordens de grandeza dos termos da equação de evolução da seção 4.1; na seção 4.4 deduz-se a forma explícita dos operadores de colisão em primeira ordem de perturbação.

No capítulo 5 são mostrados os resultados da análise de Chapman-Enskog para fluidos miscíveis e para fluidos imiscíveis, onde são apresentados resultados analíticos como a difusividade e viscosidade para misturas e para fluidos imiscíveis, largura da interface e tensão interfacial para fluidos imiscíveis, bem como as respectivas equações de transporte.

No capítulo 6 são apresentados métodos de medidas e resultados de simulação para a difusividade, a viscosidade, pressão, largura da interface e tensão interfacial.

## CAPÍTULO 2 – Modelos de Boltzmann

Neste capítulo são apresentados alguns modelos de Boltzmann para simulação de escoamento de fluidos. Na seção 2.1 são apresentados o modelo BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) monofásico no nível mesoscópico e as equações que representam sua dinâmica macroscópica. Na seção 2.2 é feita uma revisão de alguns modelos de Boltzmann bifásicos que foram as bases para a criação de novos modelos, inclusive para o modelo proposto no próximo capítulo. O primeiro modelo bifásico, apresentado na seção (2.2.1), é usado para simular o escoamento de dois fluidos miscíveis, o segundo e o terceiro, apresentados nas seções (2.2.2.a) e (2.2.2.b), são usados para simular o escoamento de fluidos imiscíveis.

### 2.1 – Modelo de Boltzmann Monofásico

#### 2.1.1 Modelos booleanos

Os modelos de Boltzmann foram desenvolvidos a partir dos modelos de gás em rede *booleanos* [McNamara & Zanetti 1988], [Qian et al. 1992]. Os modelos *booleanos* admitem partículas, todas com mesmo módulo de velocidade, “saltando” de um sítio para outro vizinho, numa rede de Bravais [Frisch & Pomeau, 1986]. O termo *booleano* é devido ao princípio de exclusão, onde somente uma partícula poder existir numa dada direção da rede em um sítio. A evolução ocorre em dois passos, um que é chamado de passo de colisão e outro chamado de passo de propagação. No passo de colisão é usado o conceito de colisão elástica entre as partículas, ou seja, para uma dada configuração anterior ao processo de colisão, existirão algumas configurações posteriores a este processo que conservam a quantidade de movimento e a massa total do sítio. O estado final do sítio é uma destas configurações escolhida aleatoriamente. No passo de propagação as partículas são transladadas na direção de suas velocidades, pós-colisão, até seus primeiros vizinhos. Estes dois passos são representados nas figuras (2.1.1.a) e (2.1.1.b).

Nem todas as redes de Bravais possuem simetria suficiente para que o fluido simulado seja isotrópico. Em 2D a rede hexagonal possui tais simetrias e a rede é chamada de FHP [Frisch et al 1986], em 3D não existe rede com simetria suficiente e o que se faz é projetar em 3D uma rede construída em 4D chamada de FCHC [d’Humières et al 1986]. Esta rede tridimensional

possui 24 vetores que ligam um sítio a seus primeiros vizinhos, tais vetores são mostrados na figura (2.1.2).

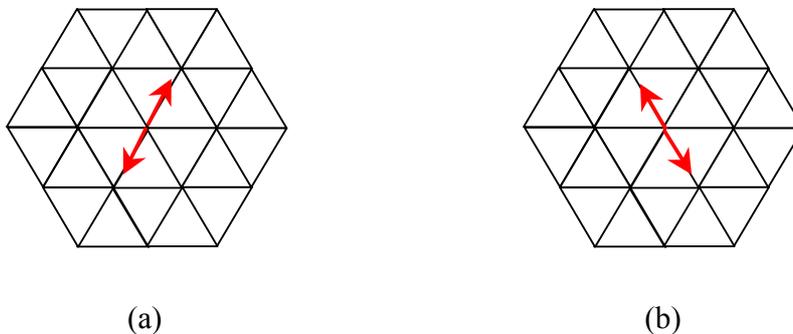


Figura 2.1.1.a – Passo do colisão: em (a) representa-se o estado inicial do sítio, onde as setas vermelhas são os vetores velocidade das partículas, em (b) o estado após o passo de colisão.

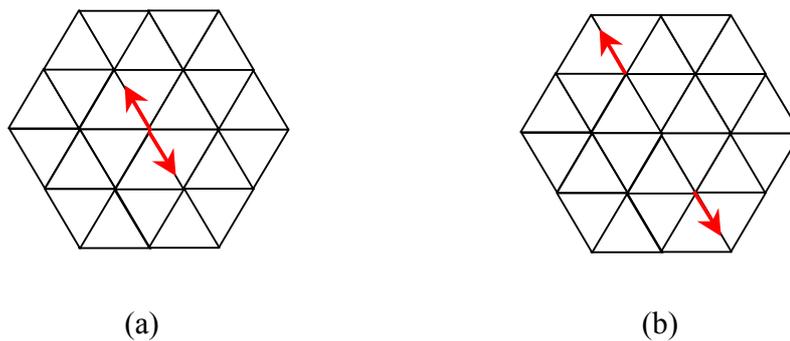


Figura 2.1.1.b – Passo de propagação: em (a) representa-se o estado do sítio depois do passo de colisão, em (b) o estado após o passo de propagação.

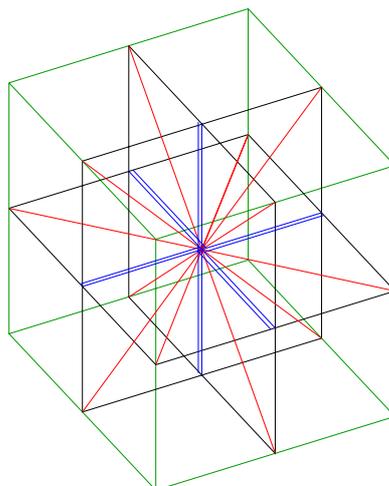


Fig. 2.1.2 – Sítio da rede FCHC (D3Q19): os 24 vetores da rede estão representados em azul e vermelho. Nas direções principais  $(x,y,z)$ , em azul, tem-se os vetores coincidindo dois a dois.

### 2.1.2 Nível Mesoscópico: Modelos de Boltzmann

Os modelos *booleanos* foram desenvolvidos por uma questão de eficiência computacional, mas paga-se um preço que é devido ao princípio da exclusão, ou seja, a distribuição de equilíbrio para as partículas num sítio é do tipo Fermi-Dirac e isto traz conseqüências como a pressão (macroscópica) depender da velocidade, além do termo inercial na equação de transporte da quantidade de movimento ser afetado removendo a invariância galileana desta equação. Os modelos de Boltzmann evoluem variáveis reais que representam a ocupação de partículas num sítio, com isso, não existe um princípio de exclusão nestes modelos introduzido pelas variáveis *booleanas*. Atualmente, constrói-se modelos de Boltzmann independentemente dos modelos *booleanos* [He & Luo 1997], [Abe 1997], interpretando-os como conseqüência da discretização da equação de Boltzmann da teoria cinética dos gases. Com isso, a distribuição de equilíbrio pode ser escolhida de modo a tornar a pressão independente da velocidade e ainda preservar a invariância galileana das equações macroscópicas. Num sítio da rede localizado em

$\vec{X}$ , no instante  $T$  o valor médio do número de partículas com velocidade  $\vec{c}_i$  é representado pela variável real  $N_i(\vec{X}, T)$  e a equação de Boltzmann para gases em rede é então escrita como<sup>1</sup>:

$$N_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = N_i(\vec{X}, T) + \Omega_i(\vec{X}, T), \quad (2.1.1)$$

onde  $\Omega_i(\vec{X}, T)$  é o operador de colisão do modelo e atualiza, no passo de colisão, o valor de  $N_i(\vec{X}, T)$ . A Eq. (2.1.1) transporta o valor “colidido” de  $N_i$  no sítio  $\vec{X}$  para o sítio  $\vec{X} + \vec{c}_i$ . No caso do modelo BGK, a forma do operador de colisão é dada pela seguinte expressão [Qian et al. 1992]:

$$\Omega_i = \frac{N_i^{eq} - N_i}{\tau}, \quad (2.1.2)$$

onde  $\tau$  é um fator constante e pondera o efeito de  $\Omega_i$  sobre  $N_i$  na equação de Boltzmann (2.1.1), que é o de aproximar  $N_i$  da distribuição de equilíbrio  $N_i^{eq}$ . Tais distribuições podem ser deduzidas impondo-se sobre ela as seguintes restrições: a conservação da massa e da quantidade de movimento, a independência da pressão com a velocidade e a invariância galileana das equações macroscópicas. As distribuições de equilíbrio devem ser simétricas por inversão da rede ( $\vec{c}_i \rightarrow -\vec{c}_i$ ) e devem depender da massa  $\rho$  e da quantidade de movimento  $\rho \vec{u}$  totais no sítio. Como a equação de Navier-Stokes é o objetivo da análise, expande-se<sup>2</sup>  $N_i^{eq}$  em uma série de potências de  $\vec{u}$  até a ordem ( $u^2$ ).

$$N_i^{eq} = A + B c_{i\alpha} u_\alpha + C c_{i\alpha} u_\alpha c_{i\beta} u_\beta + E u^2, \quad (2.1.3)$$

$$N_o^{eq} = b_r A + G u^2. \quad (2.1.4)$$

O índice  $i$  na Eq. (2.1.3) é relativo às  $b_m$  direções possíveis para o vetor velocidade  $\vec{c}_i$  das partículas,  $i$  varia de 1 até  $b_m$ . Na Eq. (2.1.4),  $N_o^{eq}$  representa a distribuição de equilíbrio para  $b_r$

---

<sup>1</sup> O vetor  $\vec{c}_i$  em (2.1.1) faz parte do vetor posição,  $\vec{c}_i \Delta t$ , que liga um sítio ao seu vizinho mais próximo.

Nos gases em rede a menor escala de tempo é  $\Delta t = 1$ .

<sup>2</sup> Os índices gregos são relativos às coordenadas espaciais e para estes vale a notação de Einstein (soma sobre índices repetidos).

partículas, indistinguíveis, em repouso, mas que podem entrar em movimento conservando a quantidade de movimento.

As restrições que as distribuições de equilíbrio devem satisfazer são dadas abaixo.

1) Conservação da massa:

$$\sum_{i=0}^{b_m} N_i^{eq} = \rho . \quad (2.1.5)$$

2) Conservação da quantidade de movimento:

$$\sum_{i=0}^{b_m} N_i^{eq} c_{i\alpha} = \rho u_\alpha . \quad (2.1.6)$$

3) Tensor densidade de fluxo de quantidade de movimento sob a forma:

$$\sum_{i=0}^{b_m} N_i^{eq} c_{i\alpha} c_{i\beta} = p \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta , \quad (2.1.7)$$

onde  $p$  é a pressão hidrostática e  $\delta_{\alpha\beta}$  é a delta de Kronecker.

Os coeficientes das Eqs. (2.1.3-2.1.4) são obtidos usando-se estas restrições juntamente com as relações abaixo [Rothman & Zaleski 1997], onde  $D$  é a dimensão euclidiana do espaço na qual a rede esta imersa e  $c^2 = |c_i|^2$ .

$$\sum_i^{b_m} c_{i\alpha} c_{i\beta} = \frac{b_m c^2}{D} \delta_{\alpha\beta} , \quad (2.1.8)$$

$$\sum_i^{b_m} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = \frac{b_m c^4}{D} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) . \quad (2.1.9)$$

Ou seja, da restrição 2) encontra-se  $B$ :

$$B = \frac{\rho D}{b_m c^2} . \quad (2.1.10)$$

Das outras restrições obtém-se:

$$A = \frac{\rho}{b_m + b_r} = \frac{\rho}{b}, \quad (2.1.11)$$

$$C = \frac{\rho D(D+2)}{2b_m c^4}, \quad (2.1.12)$$

$$E = -C \frac{c^2}{D+2}, \quad (2.1.13)$$

$$G = -\frac{\rho}{c^2}. \quad (2.1.14)$$

A pressão (tipo gás ideal) é identificada como:

$$p = \frac{b_m c^2}{bD} \rho. \quad (2.1.15)$$

Dessa maneira, as distribuições de equilíbrio para partículas em movimento e em repouso, são escritas como:

$$N_i^{eq} = \frac{\rho}{b} + \frac{\rho D}{b_m c^2} c_{i\alpha} u_\alpha + \frac{\rho D(D+2)}{2b_m c^4} c_{i\alpha} u_\alpha c_{i\beta} u_\beta - \frac{\rho D}{2b_m c^2} u^2, \quad (2.1.16)$$

$$N_o^{peq} = \frac{\rho}{b} b_r - \frac{\rho}{c^2} u^2. \quad (2.1.17)$$

### Nível Macroscópico

Com as distribuições de equilíbrio, pode-se usar o método de Chapman-Enskog para uma análise macroscópica do modelo. Nesta análise considera-se que a distribuição de equilíbrio  $N_i^o$ , observada em escala hidrodinâmica, sofre uma pequena correção quando uma escala de observação  $k_n$  menor é usada e a solução da equação de Boltzmann (2.1.1) é dada por:

$$N_i = N_i^o + k_n N_i^1 \quad (2.1.18)$$

Neste caso, o resultado de tal análise [Rothman & Zaleski 1997] conduz à equação de Navier-Stokes para fluido Newtoniano incompressível:

$$\partial_i(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(p)\delta_{\alpha\beta} + \partial_\alpha(\rho u_\alpha u_\beta) = \eta\rho(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha), \quad (2.1.19)$$

onde o coeficiente de viscosidade cinemática, em unidades de rede, é dado por:

$$\eta = \frac{c^2}{D+2} \left[ \tau - \frac{1}{2} \right] \quad (2.1.20)$$

Nota-se na expressão acima um limite inferior para  $\tau$  igual a  $\frac{1}{2}$ , abaixo deste limite o método de Boltzmann diverge e os valores de  $N_i$  tornam-se negativos.

Dessa análise conclui-se que, no limite hidrodinâmico, um valor de  $N_i$  da simulação tem como primeiro e segundo momentos, valores de  $\rho$  e de  $\rho \vec{u}$  que são soluções da equação (2.1.19).

## 2.2 – Modelos de Boltzmann Bifásicos

Admitindo a existência de dois componentes diferentes na rede, a interação entre eles pode ser responsável pela mistura ou pela separação dos componentes. No caso de mistura, as interações são de tão curto alcance que não tem efeito ordenador sobre os componentes. No caso de separação é exigida a existência de uma interação de longo alcance entre as partículas, a qual informa, às partículas de uma espécie, a existência de uma região de alta concentração da mesma espécie. O termo “longo alcance” é usado, pois, nos LB a distância entre um sítio e o seu vizinho mais próximo é da ordem de vários “livre caminho médio”. Poderia-se, no entanto, trabalhar com a distância de um livre caminho médio, mas para simular escoamento de fluidos seria exigida uma capacidade de processamento gigantesca.

Existem modelos para fluidos miscíveis e modelos para fluidos imiscíveis. Modelos para fluidos miscíveis podem ser obtidos a partir de modelos para fluidos imiscíveis, zerando-se o fator que controla a interação de longo alcance.

### 2.2.1 – Modelo de Boltzmann Miscível - Modelo de Flekkøy

O interesse nesse tipo de modelo é simular a equação da condução-difusão de massa juntamente com a equação de Navier-Stokes. O modelo [Flekkøy 1993] apresentado nesta seção consegue simular estas duas equações com coeficientes de transporte (difusividade e viscosidade) independentes um do outro. Para isso são usados dois tempos de relaxação, um relacionado ao processo de difusão de massa ( $\tau^D$ ) e o outro ao processo de transferência de quantidade de movimento ( $\tau^v$ ).

O modelo é dado pela equação de evolução das populações  $N_i = R_i + B_i$ , como no caso monofásico, e pela equação de evolução da concentração relativa de um dos componentes  $R$  ou  $B$ :

$$N_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = N_i(\vec{X}, T) + \frac{N_i(\vec{X}, T) - N_i^{peq}(\vec{X}, T)}{\tau^v}, \quad (2.2.1.1)$$

$$\theta_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = \theta_i(\vec{X}, T) + \frac{\theta_i(\vec{X}, T) - \theta_i^{peq}(\vec{X}, T)}{\tau^D}, \quad (2.2.1.2)$$

onde,

$$\theta_i = \frac{R_i}{N_i}. \quad (2.2.1.3)$$

As distribuições de equilíbrio para as populações são as mesmas do caso monofásico. Como a equação da difusão não contém termos da ordem  $u^2$ , as distribuições de equilíbrio para a concentração  $\theta_i^{peq}$  são do tipo:

$$\theta_i^{peq} = \theta \left( 1 + \frac{c_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} \right), \quad (2.2.1.4)$$

para partículas em movimento onde  $i = 1, \dots, b_m$ , e

$$\theta_0^{peq} = b_r \theta, \quad (2.2.1.5)$$

para partículas em repouso. A velocidade do som na rede é  $c_s^2 = \frac{b_m c^2}{bD}$ .

Nas expressões acima  $\theta$  é a concentração relativa de massa do tipo  $R$ , dada por:

$$\theta = \frac{\sum_i R_i}{\sum_i N_i} = \frac{\rho^r}{\rho}. \quad (2.2.1.6)$$

As Eqs. (2.2.1.2-2.2.1.4-2.2.1.5) conservam a massa do tipo  $R$ ,  $\rho^r$ .

Com uma análise de Chapman-Enskog, a equação da difusão é obtida:

$$\partial_t \theta + u \nabla \theta = D_0 \left[ \nabla^2 \theta + O(M^2) \right]. \quad (2.2.1.7)$$

Onde,  $M$  é o número de Mach,  $u/c_s$  e o coeficiente de difusão é dado pela seguinte expressão.

$$D_0 = -c_s^2 \left[ \tau^D + \frac{1}{2} \right]. \quad (2.2.1.8)$$

Para  $D_0$  ser positivo,  $\tau^D$  deve ser negativo e maior que  $\frac{1}{2}$ , não significando um tempo de relaxação negativo, mas que o sinal no termo de colisão na Eq. (2.2.1.2) deve ser invertido. A viscosidade para este modelo tem a mesma forma do modelo monofásico, Eq. (2.1.20), onde o tempo de relaxação é agora  $\tau^v$ .

Deve-se observar que o termo da ordem de  $M^2$  na equação (2.2.1.7) é não físico e exige que  $u \ll c_s$ .

Um único tempo,  $\tau^v$ , para a relaxação de massa no termo de colisão exige que as viscosidades dos dois fluidos sejam iguais.

Recentemente, outros modelos que se aplicam a fluidos miscíveis foram desenvolvidos, uma revisão dos modelos que usam operador de colisão tipo BGK é feita por Sofonea e Sekerka [Sofonea e Sekerka, 2001]. Na maioria dos modelos BGK a conservação, da massa e da quantidade de movimento, requer que os tempos de relaxação para espécies diferentes sejam idênticos, isto restringe os fluidos a possuírem viscosidades idênticas. No trabalho de Sofonea e Sekerka foi proposta uma separação no operador de colisão para cada espécie, cada parte relacionada a um parâmetro de relaxação. A conservação da quantidade de movimento neste modelo coloca a constante de relaxação para uma espécie como função da densidade da espécie. No trabalho de Sofonea e Sekerka os tempos de relaxação dependem das frequências de colisão, as quais devem estar relacionadas com as densidades, embora os autores não tenham colocado nenhuma relação de dependência particular. Esta característica é importante quando se apresentam grandes gradientes de concentração, pois os tempos de relaxação devem estar relacionados às frequências de colisões. Outro trabalho em que aparece mais de um tempo de relaxação é o de Luo e Girimaji [Luo e Girimaji, 2002]; neste o tempo de relaxação para espécies diferentes aparece num termo proporcional a diferença ( $u^r - u^b$ ) das velocidades de cada fase e que deve ser pouco importante, considerando-se a limitação para baixas velocidades do modelo. Modelos que inicialmente foram construídos para simular fluidos imiscíveis, como o de Shan-Chen apresentado na seção 2.2.2.b, podem ser usados para simular fluidos miscíveis. Modelos criados para simulação de fluidos miscíveis, geralmente tem um tempo de relaxação relacionado

às colisões entre partículas de espécies distintas, do qual a difusividade é função, no modelo de Shan-Chen, a difusividade no modelo pode ser controlada por uma força  $F$ , que atua num sítio, gerada pela configuração das “massas efetivas” (uma função arbitrária das densidades) de sua vizinhança.

## 2.2.2 – Modelos de Boltzmann Imiscíveis

O interesse nos modelos apresentados nesta seção é o de simular o escoamento de fluidos imiscíveis, no qual existe uma região comum aos dois componentes que é chamada geralmente de interface de separação. A esta região está associada uma quantidade de energia por unidade de área, chamada de tensão interfacial e que é uma propriedade física bastante interessante. A tensão interfacial atua no sentido de resistir ao processo de mistura dos componentes, como se na interface existisse uma membrana elástica permitindo aos fluidos moverem-se, mas sem que estes possam se misturar. Apresenta-se agora dois modelos de Boltzmann muito usados para fluidos imiscíveis.

### 2.2.2.a – Modelo de Gusntensen, Rothman, Zaleski e Zanetti

O modelo apresentado nesta seção [Rothman & Zaleski 1997, capítulo 10], inicialmente proposto por Gusntensen, Rothman, Zaleski e Zanetti [Gusntensen et al 1991], possui como características principais um único tempo de relaxação e três passos de colisão para os dois componentes  $R$  e  $B$ . A regra que produz a tensão interfacial é colocada no passo de colisão, modificando diretamente a distribuição de equilíbrio. Os três passos de colisão são apresentados a seguir:

- 1) Um de curto alcance onde acontece a colisão tipo monofásica.

$$R'_i + B'_i = N'_i(\vec{X}, T) = N_i(\vec{X}, T) - \frac{N_i^{eq}(\vec{X}, T) - N_i(\vec{X}, T)}{\tau} \quad (2.2.2.a.1)$$

onde a distribuição de equilíbrio  $N_i^{eq}$  é dada pela Eq. (2.1.16).

- 2) Um de longo alcance que retira partículas da direção tangente à interface e recoloca-as na direção normal criando uma tensão interfacial.

$$N_i''(\vec{X}, T) = N_i'(\vec{X}, T) + A \left| \vec{f}(\vec{X}, T) \right| \left[ \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{f})^2}{\vec{f} \cdot \vec{f}} - \frac{c^2}{D} \right], \quad (2.2.2.a.2)$$

onde  $A$  é o parâmetro que regula a intensidade da interação,  $\vec{f}(\vec{X}, T)$  é a função que localiza a interface e é definida como:

$$\vec{f}(\vec{X}, T) = \sum_i \vec{c}_i \sum_j [R_j(\vec{X} + \vec{c}_i, T) - B_j(\vec{X} + \vec{c}_i, T)] \quad (2.2.2.a.3)$$

A função  $\vec{f}(\vec{X}, T)$  é chamada de gradiente de cor quando  $R$  representa a cor vermelha (“red”) e  $B$  a cor azul (“blue”), apontando da cor azul para a vermelha, ou seja, perpendicular a interface. O fator  $\frac{c^2}{D}$  na Eq. (2.2.2.a.2) é necessário para a conservação da massa e o termo entre colchetes terá sinal negativo quando  $\vec{c}_i$  for perpendicular a  $\vec{f}$ , retirando população da direção  $i$ .

- 3) Outro de longo alcance também, onde a colisão redistribui as partículas de maneira a minimizar a difusão de massa e com isso criar uma interface de separação. O que significa escolher  $R_i''$  e  $B_i''$  tais que,

$$\sum_i (R_i'' + B_i'') \vec{c}_i \cdot \vec{f}, \quad (2.2.2.a.4)$$

seja maximizado, mas sujeito à conservação da massa do tipo  $R$ ,

$$\sum_i R_i''(\vec{X}, T) = \sum_i R_i(\vec{X}, T), \quad (2.2.2.a.5)$$

e a conservação da massa total em cada direção,

$$R_i''(\vec{X}, T) + B_i''(\vec{X}, T) = N_i''(\vec{X}, T). \quad (2.2.2.a.6)$$

Pensando em cores, pode-se dizer que neste passo as partículas são recoloridas de maneira a minimizar a difusão de uma cor na outra.

O passo de propagação não é afetado pelas novas regras e continua o mesmo que nas seções anteriores.

$$R_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = R_i''(\vec{X}, T), \quad (2.2.2.a.7)$$

$$B_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = B_i''(\vec{X}, T). \quad (2.2.2.a.8)$$

A tensão interfacial para este modelo é encontrada a partir da definição mecânica de tensão interfacial, ou seja, para uma interface tangente ao eixo x:

$$\sigma = \sum_{y^*=-\infty}^{\infty} [\pi_{yy}(y^*) - \pi_{xx}(y^*)], \quad (2.2.2.a.9)$$

onde  $\pi_{yy}(y^*)$  é o fluxo de quantidade de movimento na direção  $y$  que atravessa uma unidade de área perpendicular a direção  $y$ , na posição  $y^*$ , e é dado por:

$$\pi_{yy}(y^*) = \sum_i N_i(y^*) c_{iy} c_{iy}. \quad (2.2.2.a.10)$$

A tensão interfacial para este modelo, onde  $\tau$  deve ser negativo, [Rothman & Zaleski 1997] na rede FHP (hexagonal) é dada por:

$$\sigma = \frac{54A\rho}{b_m} \tau, \quad (2.2.2.a.11)$$

Para a rede FCHC (24 direções) a tensão interfacial encontrada é dada por:

$$\sigma = \frac{4608A\rho}{b_m} \tau. \quad (2.2.2.a.12)$$

Simulações com este modelo estão de acordo com a Lei de Laplace, Eq. (2.2.2.a.13), quando bolhas esféricas, de raio  $R$ , são formadas (interface esférica):

$$p_1 - p_2 = \frac{\sigma}{R}, \quad (2.2.2.a.13)$$

Nesta expressão  $p_1$  é a pressão dentro da bolha e  $p_2$  fora da bolha.

A tensão interfacial medida nas simulações através da Eq. (2.2.2.a.14) abaixo, para interface plana, está de acordo com a predição teórica dada pela Eq. (2.2.2.a.12).

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} [p - p_t(y)] dy. \quad (2.2.2.a.14)$$

Nesta expressão,  $p$  é a pressão hidrostática e  $p_t$  a pressão tangente à interface.

Neste modelo o passo de colisão monofásica, interação local, considera as partículas indistinguíveis e é responsável pela mistura ou desordem das fases. Os passos de interação a longa distância são responsáveis pelo ordenamento das espécies separando-as em duas fases.

Outras características do modelo apresentado são:

- Devido à existência de um único tempo de relaxação, os fluidos simulados devem ter a mesma viscosidade e a difusividade deve ser dependente da viscosidade.
- A avaliação não-local de quantidades necessárias ao processo de interação exige uma grande quantidade de processamento.
- A dinâmica do modelo utiliza um processo de maximização o que também exige uma grande quantidade de processamento.

### 2.2.2.b – Modelo de Shan e Chen

O modelo de Shan e Chen [Shan & Chen 1993] apresentado nesta seção usa uma regra de interação de longa distância distinta daquela usada na seção anterior. As colisões não conservam a quantidade de movimento local. Somente é conservada a quantidade de movimento total da rede. Para este modelo, Shan e Chen [Shan & Chen 1994] obtiveram a expressão analítica para a tensão interfacial no caso de transição de fase (um único tempo de relaxação), Shan e Doolen [Shan & Doolen 1995] obtiveram expressões para a difusividade e para a viscosidade.

O modelo de Shan e Chen admite a existência de um número  $S$  de espécies diferentes, rotuladas por  $\sigma$  e cada uma com massa molecular  $m^\sigma$ ; as respectivas equações de Boltzmann são dadas abaixo:

$$N_i^\sigma(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = N_i^\sigma(\vec{X}, T) + \Omega_i^\sigma(\vec{X}, T), \quad (2.2.2.b.1)$$

onde os índices tem os seguintes limites:  $\sigma = 1, \dots, S$  e  $i = 0, \dots, b$ .

O operador de colisão para cada espécie é da forma BGK:

$$\Omega_i^\sigma = -\frac{1}{\tau^\sigma} [N_i^\sigma - N_i^{\sigma(eq)}(\rho^\sigma, u^{\sigma(eq)})], \quad (2.2.2.b.2)$$

onde,  $\rho^\sigma = m^\sigma \sum_i N_i^\sigma$  e neste modelo o termo  $u^{\sigma(eq)}(\vec{X})$  será corrigido pela ação de uma força  $\vec{F}(\vec{X})$ , que é gerada pela configuração das “massas efetivas”  $\varphi^{\bar{\sigma}}(\rho^{\bar{\sigma}}(\vec{X}'))$  dos sítios vizinhos e pela “massa efetiva”  $\varphi^\sigma(\rho^\sigma(\vec{X}))$  da espécie  $\sigma$ . A forma da dependência da massa efetiva com a densidade implicará na forma da equação de estado para a pressão e a densidade. A intensidade da força  $\vec{F}(\vec{X})$  é proporcional ao produto das massas efetivas:

$$\vec{F}(\vec{X}) = -\varphi^\sigma(\vec{X}) \sum_X \sum_\sigma G^{\sigma\bar{\sigma}}(\vec{X}, \vec{X}') \varphi^{\bar{\sigma}}(\vec{X}') (\vec{X} - \vec{X}'). \quad (2.2.2.b.3)$$

Onde a função de Green  $G^{\sigma\bar{\sigma}}(\vec{X}, \vec{X}')$ , no caso de interação entre somente primeiros vizinhos, é dada por:

$$G^{\sigma\bar{\sigma}}(\vec{X}, \vec{X}') = \begin{cases} 0, & |\vec{X} - \vec{X}'| > c \\ g^{\sigma\bar{\sigma}}, & |\vec{X} - \vec{X}'| \leq c \end{cases} \quad (2.2.2.b.4)$$

Entretanto, se a densidade  $\rho^\sigma$  variar numa escala muito maior que a distância entre dois sítios vizinhos  $c$ , a Eq. (2.2.2.b.3) pode ser aproximada por:

$$\vec{F}^\sigma \cong -\frac{bc^2}{D} \varphi^\sigma \sum_{\bar{\sigma}} g^{\sigma\bar{\sigma}} \bar{\nabla} \varphi^{\bar{\sigma}} \quad (2.2.2.b.5)$$

Esta força então será usada, para corrigir a velocidade de equilíbrio:

$$\rho^\sigma \vec{u}^{\sigma(eq)} = \rho^\sigma \vec{u}' + \tau^\sigma \vec{F}^\sigma. \quad (2.2.2.b.6)$$

Nesta expressão a velocidade  $\vec{u}'$  é a velocidade quando  $\vec{F} = 0$ .

A forma funcional de  $N_i$  é semelhante aquelas dadas pelas Eqs. (2.1.16-2.1.17), com o acréscimo da constante arbitrária  $d_0$  relacionada às partículas em repouso e à temperatura, ou seja,

$$N_i(\rho, u) = \rho^\sigma \left[ \frac{1-d_0}{b} + \frac{D}{c^2 b} c_{i\alpha} u_\alpha + \frac{D(D+2)}{2c^4 b} c_{i\alpha} u_\alpha c_{i\beta} u_\beta - \frac{D}{2c^2 b} u_\alpha u_\alpha \right] \quad (2.2.2.b.7)$$

$$N_0(\rho, u) = \rho \left[ d_0 - \frac{1}{c^2} u_\alpha u_\alpha \right]. \quad (2.2.2.b.8)$$

Com isso, existe uma tendência, imposta pelo operador de colisão dado pela Eq. (2.2.2.b.2), de conduzir as distribuições  $N_i$  para um valor de equilíbrio  $N_i^{peq}(\rho, \vec{u}^{eq})$  no qual a força  $F$  pode ser usada de maneira a separar as espécies.

A análise de Chapman-Enskog para o modelo com dois componentes leva ao seguinte coeficiente de difusão mutua  $D_{difú}$ :

$$D_{diffu} = \frac{c^2(1-d_0)}{D} \left[ (w_1\tau_2 + w_2\tau_1)\gamma - \frac{1}{2} \right]. \quad (2.2.2.b.9)$$

Onde  $w_1$  e  $w_2$  são as concentrações  $\frac{\rho^1}{\rho}$  e  $\frac{\rho^2}{\rho}$  respectivamente, e  $\gamma$  é função dos elementos de matriz  $g^{\sigma\bar{\sigma}}$ , das massas efetivas e de suas derivadas em relação as suas concentrações.

A viscosidade cinemática é dada por:

$$\eta = c^2 \left[ \sum_{\sigma} w_{\sigma} \tau^{\sigma} - \frac{1}{2(D+2)} \right]. \quad (2.2.2.b.10)$$

Para o caso de um único componente,  $\tau^1 = \tau^2 = \tau$ , foi encontrado uma expressão integral para a tensão interfacial que está de acordo com valores simulados e com a Lei de Laplace.

A maneira como foi montado o modelo leva a algumas características:

- Para que a quantidade de movimento total seja conservada, os tempos de relaxação devem ser iguais, ou seja, as viscosidades devem ser iguais e estão amarradas à difusividade.
- A avaliação não-local de quantidades necessárias ao processo de interação exige uma grande quantidade de processamento.
- Alterar um dos parâmetros da distribuição de equilíbrio, introduz no operador de colisão os efeitos dessa mudança. Este foi um passo importante na construção do modelo a ser apresentado a seguir, no próximo capítulo.

### **CAPÍTULO 3 - Modelo de Boltzmann para Fluidos Miscíveis-Imiscíveis**

Simular escoamentos bifásicos significa reconhecer na dinâmica mesoscópica da equação de Boltzmann (gás em rede), a dinâmica das equações diferenciais que regem tais escoamentos, como a equação para o transporte de massa e a equação para o transporte de quantidade de movimento, as quais são simuladas ao mesmo tempo, podendo ainda existir outras equações diferenciais a serem reconhecidas. Assim, o interesse em recuperar propriedades físicas no nível macroscópico, dá a liberdade para que no nível da equação de Boltzmann existam dispositivos que não tenham relevância física, como por exemplo, a discretização das velocidades, ou das posições, ou partículas que não possuem massa que serão chamadas de mediadores de interação (semelhantemente ao conceito de fótons do eletromagnetismo).

Neste capítulo apresenta-se o modelo de Boltzmann desenvolvido para a simulação de escoamentos bifásicos, a três parâmetros de relaxação: um para cada fase pura e um para a mistura. O modelo aqui proposto usa um único parâmetro de interação, que regula a intensidade da interação de longo alcance, semelhante ao modelo da seção (2.2.2.a). Como será visto no capítulo 5, a difusividade para este modelo é independente da viscosidade de cada fase pura, as quais também são independentes uma da outra. Na seção 3.1 são apresentados as equações de evolução e os operadores de colisão que definem o modelo. Na seção 3.2 são apresentadas e analisadas as distribuições de equilíbrio usadas nos operadores de colisão do modelo.

#### **3.1 - Equação de Evolução e Operadores de Colisão**

Para propor o modelo a ser apresentado, pensou-se numa interação entre partículas de mesma espécie, distinta da interação entre partículas de espécies diferentes. As interações de curto alcance entre partículas de mesma espécie estão relacionadas intimamente com a viscosidade de cada espécie. As interações de curto alcance entre partículas de espécies diferentes estão relacionadas com a difusividade de uma espécie na outra e com a viscosidade da mistura. O interesse do trabalho, no caso imiscível, é o de separar espécies e apenas a interação de longo alcance entre espécies diferentes serão consideradas. A interação é introduzida neste modelo através do conceito de mediadores descrito por Santos e Philippi (2000). No capítulo 5, a análise do modelo será separada em duas partes, uma para fluidos miscíveis e outra para fluidos

imiscíveis. Estas duas análises são feitas separadamente nos trabalhos [Facin, P. C., Santos, L. O. E., Philippi, P. C., (2003)] e [Santos, L. O. E., Facin, P. C., Philippi, P. C., (2003)] respectivamente, os quais são apresentados em anexo nos apêndices **I** e **II**.

Como no capítulo 2, os esquemas de evolução das funções distribuição de partículas do tipo R e do tipo B, seguem as equações de Boltzmann, como abaixo:

$$R_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = R_i(\vec{X}, T) + \Omega_i^{rr}(\vec{X}, T) + \Omega_i^{rb}(\vec{X}, T), \quad (3.1.1)$$

$$B_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = B_i(\vec{X}, T) + \Omega_i^{bb}(\vec{X}, T) + \Omega_i^{br}(\vec{X}, T), \quad (3.1.2)$$

para  $i = 0, \dots, bm$ .

A Eq. (3.1.1) descreve a evolução de  $b_m$  funções distribuição de partículas em movimento e  $b_r$  funções distribuição de partículas em repouso, ambas do tipo R. As funções distribuição de partículas em repouso não dependem das direções da rede e o valor zero é atribuído ao índice  $i$  representando todas estas distribuições. Nas  $b$  totais equações em que se desdobra a Eq. (3.1.1), em cada  $\Omega_i^{rr}$ , são consideradas colisões entre as partículas do tipo R e em  $\Omega_i^{rb}$  colisões entre partículas do tipo R com partículas do tipo B. A interação de longo alcance acontece somente entre espécies diferentes e é colocada no operador  $\Omega_i^{rb}$ . Para a Eq. (3.1.2), a análise para partículas do tipo B é análoga.

As etapas de colisão para o modelo são dadas pelas seguintes expressões:

$$R_i'(\vec{X}, T) = R_i(\vec{X}, T) + \Omega_i^{rr}(\vec{X}, T) + \Omega_i^{rb}(\vec{X}, T), \quad (3.1.3)$$

$$B_i'(\vec{X}, T) = B_i(\vec{X}, T) + \Omega_i^{bb}(\vec{X}, T) + \Omega_i^{br}(\vec{X}, T). \quad (3.1.4)$$

Os operadores de colisão do modelo são do tipo BGK e para as colisões entre as partículas do tipo R,  $\Omega_i^{rr}$  na Eq. (3.1.2) é escrito como:

$$\Omega_i^{rr} = \frac{\rho^r}{\rho\tau^r} \{R_i^0(\rho^r, \vec{u}^r) - R_i\}. \quad (3.1.5)$$

Na equação (3.1.5),  $R_i^0(\rho^r, \bar{u}^r)$  representa a distribuição de equilíbrio para as partículas do tipo R, na situação em que não há partículas do tipo B (fase pura). As distribuições de equilíbrio têm a forma geral daquelas encontradas no capítulo 2, onde a pressão é independente da velocidade e as equações macroscópicas possuem invariância galileana. O operador de colisão  $\Omega_i^{rr}$  age no sentido de conduzir  $R_i$  para  $R_i^0(\rho^r, \bar{u}^r)$ , num tempo de relaxação dado por  $\frac{\tau^r}{w^r}$ , onde a concentração  $w^r$ , ou  $\frac{\rho^r}{\rho}$ , está representando a probabilidade de colisão entre partículas do tipo R.

Para colisões entre as partículas do tipo B ocorre o análogo:

$$\Omega_i^{bb} = \frac{\rho^b}{\rho\tau^b} \{B_i^0(\rho^b, \bar{u}^b) - B_i\}. \quad (3.1.6)$$

Os operadores de colisão que representam colisões entre partículas de tipos diferentes, são dados por:

$$\Omega_i^{rb} = \frac{\rho^b}{\rho\tau^m} \{R_i^0(\rho^r, \bar{v}^b) - R_i\}, \quad (3.1.7)$$

$$\Omega_i^{br} = \frac{\rho^r}{\rho\tau^m} \{B_i^0(\rho^b, \bar{v}^r) - B_i\}. \quad (3.1.8)$$

Estes operadores são os responsáveis pela separação das espécies no caso imiscível. Na expressão dada pela Eq. (3.1.7), que representa as colisões entre partículas do tipo R com partículas do tipo B, a velocidade na distribuição de equilíbrio é especial. O operador  $\Omega_i^{rb}$  tenta conduzir  $R_i$  para a distribuição  $R_i^0(\rho^r, \bar{v}^b)$  onde  $\bar{v}^b$  é a velocidade do fluido do tipo B,  $\bar{u}^b$ , alterada pela influência dos mediadores. O conceito de mediadores usado neste trabalho é uma extensão do conceito usado no modelo original de Santos e Philippi aplicado aos modelos de Boltzmann para fluidos imiscíveis. Mediadores são partículas sem massa emitidas de um sítio da rede e cuja ação é somente inverter a quantidade de movimento das partículas da rede, simulando um campo de longo alcance.

Com o interesse de separar simetricamente as espécies, os mediadores emitidos são de dois tipos, R e B. Mediadores R e B emitidos de um sítio, exercerão força sobre as partículas da vizinhança do sítio. Os mediadores são então **criados** em um sítio  $\vec{X}$  num passo de propagação  $T$  de acordo com as concentrações locais, como abaixo, para mediadores do tipo R e do tipo B respectivamente:

$$M_i^r(\vec{X}, T) = \frac{\rho^r(\vec{X}, T)}{\rho(\vec{X}, T)}, \quad (3.1.9)$$

$$M_i^b(\vec{X}, T) = \frac{\rho^b(\vec{X}, T)}{\rho(\vec{X}, T)}. \quad (3.1.10)$$

**No passo de propagação** os mediadores de ambos os tipos são levados até seus vizinhos mais próximos e depois de sua ação, ou não, junto as partículas eles são **aniquilados**. Com isso, num sítio, a cada passo de propagação, chega a informação sobre as concentrações dos primeiros vizinhos. Usando esta informação, na forma de um vetor unitário,  $\hat{v}^m$ , definido abaixo,

$$\hat{v}^m(\vec{X}, T+1) = \frac{\sum_i [M_i^r(\vec{X} - \vec{c}_i, T) - M_i^b(\vec{X} - \vec{c}_i, T)] \vec{c}_i}{\left| \sum_i [M_i^r(\vec{X} - \vec{c}_i, T) - M_i^b(\vec{X} - \vec{c}_i, T)] \vec{c}_i \right|}, \quad (3.1.11)$$

alteram-se as velocidades  $\vec{u}^b$  e  $\vec{u}^r$ , **conservando-se a quantidade de movimento**, da seguinte forma:

$$\vec{v}^b = \vec{u}^b - A \hat{v}^m, \quad (3.1.12)$$

$$\vec{v}^r = \vec{u}^r + A \hat{v}^m. \quad (3.1.13)$$

Nas duas expressões anteriores,  $A$  é o fator de interferência, ou parâmetro de interação, que regula a intensidade da ação dos mediadores sobre as partículas. No caso de uma interface ser estabelecida, ambos os mediadores carregam a mesma informação de onde está cada fase e  $\hat{v}^m$  aponta sempre no sentido indo da fase do tipo R para a fase do tipo B. Com isso, a equação (3.1.12) em  $\Omega_i^{rb}$  tem como efeito tentar orientar o fluxo de partículas do tipo R, na direção dos

mediadores do tipo B (ou na direção oposta aos mediadores do tipo R). Ou seja, partículas do tipo R fogem da fase tipo B de onde saem os mediadores do tipo B e são atraídas pela fase tipo R, de onde saem os mediadores do tipo R. O mesmo acontece com a equação (3.1.12) em  $\Omega_i^{br}$  para o fluxo de partículas do tipo B.

O uso das concentrações como ponderações sobre os termos de colisão evitam que regiões do domínio, onde não existe fluido do tipo B, por exemplo, sejam contabilizadas no operador de colisão  $\Omega_i^{rb}$  durante a simulação. Ou seja, se  $\rho^b$  é nulo então  $\bar{u}^b$  também o é, assim como  $\bar{v}^b$ , com isso o termo  $R_i^0(\rho^r, \bar{v}^b)$  se reduz a distribuição de equilíbrio para a fase pura do tipo R com velocidade nula  $R_i^0(\rho^r, 0)$  e  $\Omega_i^{rb}$  seria diferente de zero sem as ponderações, já que  $R_i$  fora do equilíbrio é diferente de  $R_i^0(\rho^r, 0)$ .

Os valores de  $R_i$  e  $B_i$ , depois da colisão, para os dois tipos de fluidos são então dadas por:

$$R_i' = R_i + \frac{\rho^r}{\rho\tau^r} \{R_i^0(\rho^r, \bar{u}^r) - R_i\} + \frac{\rho^b}{\rho\tau^m} \{R_i^0(\rho^r, \bar{v}^b) - R_i\}, \quad (3.1.14)$$

$$B_i' = B_i + \frac{\rho^b}{\rho\tau^b} \{B_i^0(\rho^b, \bar{u}^b) - B_i\} + \frac{\rho^r}{\rho\tau^m} \{B_i^0(\rho^b, \bar{v}^r) - B_i\}. \quad (3.1.15)$$

Os operadores de colisão satisfazem as seguintes leis de conservação:

i) Conservação das espécies individuais R e B

$$\sum_{i=0}^{bm} (\Omega_i^{rr} + \Omega_i^{rb}) = 0, \quad (3.1.16)$$

$$\sum_{i=0}^{bm} (\Omega_i^{bb} + \Omega_i^{br}) = 0. \quad (3.1.17)$$

ii) conservação da quantidade de movimento total

$$\sum_{i=1}^{bm} (\Omega_i^{rr} + \Omega_i^{rb} + \Omega_i^{bb} + \Omega_i^{br}) \bar{c}_i = 0. \quad (3.1.18)$$

### 3.2 - Distribuições Estacionárias

Em modelos miscíveis, sem interação de longo alcance, a situação de equilíbrio acontece quando os efeitos das colisões são nulos, embora ainda exista o movimento das partículas de um sítio para outro. Na situação em que uma interface de separação entre dois fluidos encontra-se imóvel no espaço e estabilizada em suas dimensões, o movimento das partículas em seu interior não é aleatório caracterizando uma situação de equilíbrio como para fluidos miscíveis, mas organizado caracterizando uma situação de desequilíbrio. No modelo proposto neste capítulo, as populações são organizadas pelos mediadores de maneira que, numa situação estacionária, onde o fluxo difusivo é cancelado, e seus valores estacionários  $R_i^*$  e  $B_i^*$  respeitam as condições de estabilidade abaixo:

$$R_i^{**} = R_{-i}^* \quad (3.2.1)$$

$$B_i^{**} = B_{-i}^* \quad (3.2.2)$$

Com isso, as distribuições que são as soluções das equações de Boltzmann (3.1.3) e (3.1.4), neste caso são avaliadas por:

$$\frac{\rho^r}{\rho\tau^r} [R_i^o(\rho^r, \bar{u}^r) - R_i^*] + \frac{\rho^b}{\rho\tau^m} [R_i^o(\rho^r, \bar{v}^b) - R_i^*] = R_{-i}^* - R_i^*, \quad (3.2.3)$$

$$\frac{\rho^b}{\rho\tau^b} \{B_i^o(\rho^b, \bar{u}^b) - B_i^*\} + \frac{\rho^r}{\rho\tau^m} \{B_i^o(\rho^b, \bar{v}^r) - B_i^*\} = B_{-i}^* - B_i^*. \quad (3.2.4)$$

Ou seja,  $R_i^*, B_i^*$  são as populações do tipo R e do tipo B na situação de estabilidade da interface e são dados por:

$$R_i^* = \frac{1}{(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)} \{ \rho^r \tau^m R_i^o(\rho^r, \bar{u}^r) + \rho^b \tau^r R_i^o(\rho^r, \bar{v}^b) + \tau^r \tau^m \rho (R_i^* - R_{-i}^*) \}, \quad (3.2.5)$$

$$B_i^* = \frac{1}{(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)} \left\{ \rho^b \tau^m B_i^o(\rho^b, \bar{u}^b) + \rho^r \tau^b B_i^o(\rho^b, \bar{v}^r) + \tau^b \tau^m \rho (B_i^* - B_{-i}^*) \right\}. \quad (3.2.6)$$

As parcelas  $(R_i^* - R_{-i}^*)$  e  $(B_i^* - B_{-i}^*)$  podem ser obtidas escrevendo-se expressões análogas às Eq. (3.2.5-4.2.6) mudando-se  $i$  por  $-i$ , realizando-se as somas obtém-se:

$$R_i^* - R_{-i}^* = \frac{\tau^r \tau^m}{(w^r \tau^m + w^b \tau^r - 2\tau^r \tau^m)} \left\{ \frac{w^r}{\tau^r} [R_i^0(\rho^r, \bar{u}^r) - R_{-i}^0(\rho^r, \bar{u}^r)] + \frac{w^b}{\tau^m} [R_i^0(\rho^r, \bar{v}^b) - R_{-i}^0(\rho^r, \bar{v}^b)] \right\}, \quad (3.2.7)$$

$$B_i^* - B_{-i}^* = \frac{\tau^b \tau^m}{(w^b \tau^m + w^r \tau^b - 2\tau^b \tau^m)} \left\{ \frac{w^b}{\tau^b} [B_i^0(\rho^b, \bar{u}^b) - B_{-i}^0(\rho^b, \bar{u}^b)] + \frac{w^r}{\tau^m} [B_i^0(\rho^b, \bar{v}^r) - B_{-i}^0(\rho^b, \bar{v}^r)] \right\}. \quad (3.2.8)$$

Neste caso então,  $R_i^*$  e  $B_i^*$  são uma composição, ponderada pelos parâmetros de relaxação, das distribuições de equilíbrio para as fases puras,  $R_i^0(\rho^r, \bar{u}^r)$  e  $B_i^0(\rho^b, \bar{u}^b)$ ,  $R_i^0(\rho^r, \bar{v}^r)$ ,  $B_i^0(\rho^b, \bar{v}^b)$ . Explicitando estas distribuições obtém-se:

$$R_i^* - R_{-i}^* = \frac{\tau^r \tau^b}{(w^r \tau^b + w^b \tau^r - 2\tau^r \tau^b)} \left[ 2 \frac{w^r}{\tau^r} \frac{D}{b_m c^2} \rho^r \bar{u}^r \cdot \bar{c}_i + \frac{w^b}{\tau^m} \rho^r (\bar{u}^b - A \bar{v}^m) \cdot \bar{c}_i \right] \quad (3.2.9)$$

$$B_i^* - B_{-i}^* = \frac{\tau^r \tau^b}{(w^b \tau^r + w^r \tau^b - 2\tau^r \tau^b)} \left[ 2 \frac{w^b}{\tau^b} \frac{D}{b_m c^2} \rho^b \bar{u}^b \cdot \bar{c}_i + \frac{w^r}{\tau^m} \rho^b (\bar{u}^r - A \bar{v}^m) \cdot \bar{c}_i \right] \quad (3.2.10)$$

Estes termos não têm efeito nos cálculos posteriores quando a velocidade do escoamento for nula, pois, as quantidades avaliadas são sempre como as dadas na Eq. (3.2.7), ou seja:

$$\sum_i (R_{-i} - R_i) = \sum_i (R_{-i} - R_i) c_{i\alpha} = \sum_i (R_{-i} - R_i) c_{i\alpha} c_{i\beta} = 0. \quad (3.2.11)$$

Para fluidos miscíveis o último termo nas Eqs. (3.2.5-3.2.6) se anula e a situação de *equilíbrio* estará condicionada a:

$$u_\alpha = u_\alpha^r = u_\alpha^b. \quad (3.2.12)$$

Ou seja, cada fluido é descrito por uma situação de equilíbrio que depende apenas da sua concentração e da velocidade da mistura  $u$  e com isso, as distribuições de equilíbrio são dadas por:

$$R_i^* = R_i^o(\rho^r, \bar{u}), \quad (3.2.13)$$

$$B_i^* = B_i^o(\rho^b, \bar{u}). \quad (3.2.14)$$

As distribuições de equilíbrio tem a forma geral daquelas encontradas no capítulo 2, onde a pressão é independente da velocidade e as equações macroscópicas possuem invariância galilean; por exemplo, para  $R_i^o(\rho^r, u^r)$ :

$$R_i^o(\rho^r, \bar{u}^r) = \frac{\rho^r}{b} + \frac{D\rho^r}{b_m c^2} c_{ia} u_a^r + \frac{D(D+2)\rho^r}{2b_m c^4} c_{ia} c_{i\beta} u_a^r u_\beta^r - \frac{D\rho^r}{2b_m c^2} (u^r)^2, \quad (3.2.15)$$

$$R_0^o(\rho^r, \bar{u}^r) = \frac{b_r \rho^r}{b} - \frac{\rho^r}{c^2} (u^r)^2, \quad (3.2.16)$$

onde  $i = 1, \dots, b_m$  refere-se às  $b_m$  partículas em movimento e o índice zero na Eq. (3.2.16) refere-se a  $b_r$  partículas em repouso.

## CAPÍTULO 4 - Expansão de Chapman-Enskog

O objetivo da utilização da expansão de Chapman-Enskog é, a partir das equações de Boltzmann do modelo proposto no capítulo 3, obter-se as equações de Navier-Stokes e da condução-difusão de massa e seus respectivos coeficientes de transporte. Para isso, primeiramente deve-se usar escalas de observação, no espaço e no tempo discretos, para que as equações de Boltzmann descrevam o comportamento contínuo da função de distribuição. A análise é válida para escalas que respeitam o limite hidrodinâmico, ou seja, para tamanhos de rede muito maiores que o espaçamento dos sítios da rede. A expansão de Chapman-Enskog da função distribuição de partículas é realizada em torno de uma distribuição de equilíbrio, a qual neste trabalho é escolhida para o caso em que não há interação, ou seja, equilíbrio de mistura onde a velocidade de cada fase é a mesma e igual a velocidade da mistura. Dessa maneira, os gradientes de concentração e a influência da interação de longo alcance promovem perturbações ao equilíbrio de mistura na região de interface. Esta hipótese mostrou-se satisfatória quando o fator  $A$  de interação é pequeno na análise para a interface.

### 4.1 – Equação diferencial para a evolução da função de distribuição

Todas as informações a respeito da dinâmica do sistema estão contidas nas equações de evolução de Boltzmann, Eqs. (3.1.1-3.1.2). Numa simulação, no limite hidrodinâmico e para certos parâmetros do modelo, o valor da massa e da quantidade de movimento associado a um sítio é igual a aquele que seria gerado pela equação de Navier-Stokes para a mesma simulação. Para atingir uma descrição em termos de variáveis contínuas usa-se um par de escalas  $h$  e  $\delta$ , para o comprimento e o tempo físicos respectivamente:

$$\bar{x} = h\vec{X}, \quad t = \delta T, \quad (4.1.1)$$

tais que as distribuições  $R_i$  e  $B_i$  possam ser consideradas funções contínuas das novas variáveis  $\bar{x}$  e  $t$ , neste caso  $h, \delta \ll 1$ .

Com isso, as equações de Boltzmann (3.1.1) e (3.1.2) para os dois tipos de partículas R e B tornam-se:

$$R_i(\bar{x} + h\vec{c}_i, t + \delta) = R_i(\bar{x}, t) + \Omega_i^{rr}(\bar{x}, t) + \Omega_i^{rb}(\bar{x}, t), \quad (4.1.2)$$

$$B_i(\bar{x} + h\bar{c}_i, t + \delta) = B_i(\bar{x}, t) + \Omega_i^{bb}(\bar{x}, t) + \Omega_i^{br}(\bar{x}, t). \quad (4.1.3)$$

Para escalas  $h$  e  $\delta$  muito pequenas, as populações não variam muito de um sítio para outro, sendo possível expandir-se  $R_i(\bar{x} + h\bar{c}_i, t + \delta)$  e  $B_i(\bar{x} + h\bar{c}_i, t + \delta)$  numa série de Taylor em torno dos respectivos valores  $R_i(\bar{x}, t)$  e  $B_i(\bar{x}, t)$ . Para as partículas do tipo  $R$  obtém-se a seguinte equação diferencial para a evolução da função distribuição:

$$h \left[ \frac{\delta}{h} \partial_i R_i + c_{i\alpha} \partial_\alpha R_i \right] + \frac{h^2}{2} \left[ \frac{\delta^2}{h^2} \partial_i^2 R_i + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta R_i + 2 \frac{\delta}{h} c_{i\alpha} \partial_\alpha \partial_i R_i \right] + O(h^3) = \Omega_i^r, \quad (4.1.4)$$

onde  $\Omega_i^r = \Omega_i^{rr} + \Omega_i^{rb}$ . Visando a análise macroscópica, usam-se as variáveis adimensionais abaixo:

$$t^* = \frac{t}{t_c}, \quad (4.1.5.a)$$

$$\bar{x}^* = \frac{\bar{x}}{L}. \quad (4.1.5.b)$$

onde  $L \gg h$  e  $t_c \gg \delta$  são as escalas hidrodinâmicas para o comprimento e para o tempo característico respectivamente. A expressão dada pela Eq. (4.1.4) toma a seguinte forma:

$$\left[ \frac{\delta}{t_c h} \partial_{i^*} R_i + \frac{1}{L} c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i \right] + \frac{h}{2} \left[ \frac{\delta^2}{t_c h^2} \partial_{i^*}^2 R_i + \frac{1}{L^2} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} R_i + 2 \frac{\delta}{t_c h L} c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} \partial_{i^*} R_i \right] = \frac{\Omega_i^r}{h} \quad (4.1.6.a)$$

Definindo as variáveis de “macroscopização”  $k_n = \frac{h}{L} \ll 1$  e  $\varepsilon = \frac{\delta}{t_c} \ll 1$ , reescreve-se a

Eq. (4.1.6) na forma a seguir.

$$\left[ \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} R_i + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i \right] + \frac{k_n}{2} \left[ \frac{\varepsilon^2}{k_n^2} \partial_{i^*}^2 R_i + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} R_i + 2 \frac{\varepsilon}{k_n} c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} \partial_{i^*} R_i \right] = \frac{\Omega_i^r}{k_n} . \quad (4.1.6.b)$$

A expressão anterior se torna mais clara agrupando-se os termos semelhantes,

$$\left[ \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} R_i + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i \right] + \frac{k_n}{2} \left[ \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} \left[ \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} R_i + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i \right] + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} \left[ \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} R_i + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i \right] \right] = \frac{\Omega_i^r}{k_n} . \quad (4.1.7)$$

Agora, separando  $R_i$  em uma parte relacionada ao equilíbrio e outra parte relacionada com as perturbações a este equilíbrio, ou seja, a expansão de Chapman-Enskog,

$$R_i = R_i^0 + k_n R_i^1 + k_n^2 R_i^2 + \dots , \quad (4.1.8)$$

o operador de colisão na Eq. (4.1.4) tem uma decomposição induzida,

$$\Omega_i^r = \Omega_0^r + k_n \Omega_i^{1r} + (k_n)^2 \Omega_i^{2r} + \dots . \quad (4.1.9)$$

Com isso, a Eq. (4.1.7) torna-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} R_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i^0 + \\ & + \frac{k_n}{2} \left[ \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} \left( \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} R_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i^0 \right) + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} \left( \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} R_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i^0 \right) \right. \\ & \left. + 2 \frac{\varepsilon}{k_n} \partial_{i^*} R_i^1 + 2 c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i^1 \right] = \frac{\Omega_0^r}{k_n} + \Omega_i^{1r} + k_n \Omega_i^{2r} \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Para  $\varepsilon \cong k_n$ , o termo dominante é  $\Omega_0^r$  quando  $k_n \rightarrow 0$ , ou seja, a dinâmica da função distribuição é dominada pelas interações descritas por  $\Omega_0^r$ . A Eq. (4.1.10) representa o caso geral da evolução das distribuições de equilíbrio (local) de partículas do tipo R,  $R_i^0$ , quando se conhece as perturbações  $\Omega_i^{r1}$  e  $R_i^1$ . Para um dado operador de colisão,  $R_i^0$  toma uma forma particular assim como  $\Omega_i^{r1}$  e  $R_i^1$ , o que será feito na próxima seção. Os valores de  $\Omega_i^{r1}$  dependem da escala  $k_n$  de observação em primeira ordem e serão encontrados na seção 4.4, os quais permitirão encontrar  $R_i^1$  na seção 5.1 do capítulo 5.

#### 4.2 – Distribuição de equilíbrio para a Expansão de Chapman-Enskog

A distribuição  $R_i^0$  na Eq. (4.1.10) é escolhida como sendo a distribuição de equilíbrio para a mistura, ou seja,  $R_i^{eq}(\rho^r, \bar{u})$ , o qual define  $\rho^r \bar{u}$  como de ordem zero na análise de Chapman-Enskog. Para uma mistura em equilíbrio a velocidade da fase do tipo R deve ser igual à velocidade da fase do tipo B, que são iguais à velocidade do escoamento. Com o efeito do campo de mediadores, de promover um pequeno desvio na velocidade do fluido do tipo R, o fluxo de massa  $\bar{j}^r = \rho^r (\bar{u}^r - \bar{u})$  é diferente de zero. Este termo é de ordem 1 em  $k_n$ , ou seja :

$$\bar{j}^r = \rho^r (\bar{u}^r - \bar{u}) = \sum_i R_i \bar{c}_i - \rho^r \bar{u} = \sum_i (R_i^0 + k_n R_i^1 + \dots) \bar{c}_i - \rho^r \bar{u}, \quad (4.2.1)$$

e desde que  $\sum_i R_i^{eq}(\rho^r, \bar{u}) \bar{c}_i = \rho^r \bar{u}$  tem-se:

$$\bar{j}^r = \sum_i k_n R_i^1 + O(k_n^2) = k_n \bar{j}^{r,1} + O(k_n^2). \quad (4.2.2)$$

Por outro lado, no equilíbrio de mistura total ( $A = 0$ ) não existem mediadores, ou seja, eles apareceram como perturbação em primeira ordem se  $A \cong k_n$  :

Com isso, o operador de colisão pode ser explicitado em termos das ordens de  $k_n$ , usando-se  $\rho u_\alpha = \rho^r u_\alpha^r + \rho^b u_\alpha^b$  e  $\bar{v}^b = \bar{u}^b - A \hat{v}^m$  nas distribuições  $R_i^{eq}(\rho^r, \bar{u}^r)$  e  $R_i^{eq}(\rho^r, \bar{v}^b)$  :

$$\begin{aligned}
\Omega_i^r &= \left( \frac{w^r}{\tau^r} + \frac{w^b}{\tau^m} \right) \left\{ R_i^{eq}(\rho^r, \vec{u}) - R_i^0 - k_n R_i^1 - \dots \right\} + \\
&+ \frac{D}{b_m c^2} \left( \frac{w^r}{\tau^r} - \frac{w^r}{\tau^m} \right) \left\{ c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right\} j_\alpha^{r,1} k_n \\
&- \frac{D}{b_m c^2} \frac{\rho w^b w^r}{\tau^m} \left\{ c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right\} \left( v_\alpha^m \frac{A}{k_n} \right) k_n + \Omega_i^{r,2}(k_n^2). \tag{4.2.3}
\end{aligned}$$

O mesmo acontece para o tipo de partículas B:

$$\begin{aligned}
\Omega_i^b &= \left( \frac{w^b}{\tau^b} + \frac{w^r}{\tau^m} \right) \left\{ B_i^{eq}(\rho^b, \vec{u}) - B_i^0 - k_n B_i^1 - \dots \right\} + \\
&- \frac{D}{b_m c^2} \left( \frac{w^b}{\tau^b} - \frac{w^b}{\tau^m} \right) \left\{ c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right\} j_\alpha^{r,1} k_n + \\
&+ \frac{D}{b_m c^2} \frac{\rho w^b w^r}{\tau^m} \left\{ c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right\} \left( v_\alpha^m \frac{A}{k_n} \right) k_n + \Omega_i^{r,2}(k_n^2). \tag{4.2.4}
\end{aligned}$$

### 4.3 – Escalas de Observação

Analisando a Eq. (4.1.10), re-escrita abaixo em unidades físicas, mas agora numa escala  $L$  na qual pode-se desprezar os termos de ordem  $k_n^2$ ,

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{\delta}{h} \partial_t R_i^0 + c_{i\alpha} \partial_\alpha R_i^0 \right] + \\ & + \frac{h}{2L} \left[ \frac{\delta}{h} \partial_t \left( \frac{\delta}{h} \partial_t R_i^0 + c_{i\alpha} \partial_\alpha R_i^0 \right) + c_{i\alpha} \partial_\alpha \left( \frac{\delta}{h} \partial_t R_i^0 + c_{i\alpha} \partial_\alpha R_i^0 \right) + \right. \\ & \left. + 2 \frac{\delta}{h} \partial_t R_i^1 + 2 c_{i\alpha} \partial_\alpha R_i^1 \right] = \frac{\Omega_i^{1r} + h \Omega_i^{2r}}{L}, \end{aligned} \quad (4.3.1)$$

obtém-se:

$$\left[ \frac{\delta}{h} \partial_t R_i^0 + c_{i\alpha} \partial_\alpha R_i^0 \right] = \frac{\Omega_i^{1r}}{L}. \quad (4.3.2.a)$$

Analogamente para o tipo B, obtém-se:

$$\left[ \frac{\delta}{h} \partial_t B_i^0 + c_{i\alpha} \partial_\alpha B_i^0 \right] = \frac{\Omega_i^{1b}}{L}. \quad (4.3.2.b)$$

Nas equações anteriores os vetores velocidade da rede  $c_{i\alpha}$  estão em unidades de rede, para que estes sejam expressos como variáveis físicas multiplicam-se as equações pelo fator  $\frac{h}{\delta}$ , com isso,

$$c_{i\alpha}^f = \frac{h}{\delta} c_{i\alpha}. \quad (4.3.3)$$

Ou seja, o operador de colisão em unidades físicas é dado por:

$$\left[ \partial_t R_i^0 + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha R_i^0 \right] = \frac{h}{\delta} \frac{\Omega_i^{1r}}{L} \quad (4.3.4)$$

A Eq. (4.3.4) quando somada sobre  $i$ , resulta na equação de conservação da massa do tipo R dada pela Eq. (4.3.6). Quando a Eq. (4.3.4) for somada com a sua análoga para o tipo B, Eq. (4.3.2.b), e antes de serem somadas em  $i$ , forem multiplicadas por  $\bar{c}_i$ , resulta na equação de transporte da quantidade de movimento para fluidos sem viscosidade (Equação de Euler) Eq. (4.3.7). Isto porque, por definição, ver as Eqs. (3.1.16-17) e a Eq. (3.1.20), a massa individual e a quantidade de movimento total são completamente determinadas em ordem zero, ou seja,

$$\sum_i \Omega_i^{1r} = \sum_i (\Omega_i^{1r} + \Omega_i^{1b}) \bar{c}_i^f = 0, \quad (4.3.5)$$

$$\partial_t \rho^r + \partial_\alpha (\rho^r u_\alpha^r) = 0, \quad (4.3.6)$$

$$\partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha \pi_{\alpha\beta}^0 = 0, \quad (4.3.7)$$

onde o tensor fluxo da quantidade de movimento  $\pi_{\alpha\beta}^0$  é dado por:

$$\pi_{\alpha\beta}^0 = \sum_i (R_i^0 + B_i^0) c_{i\alpha}^f c_{i\beta}^f. \quad (4.3.8)$$

Para obter as expressões anteriores, foram usados os seguintes vínculos:

- massa do tipo R

$$\sum_{i=1}^{bm} R_i^0 + b_r R_0^0 = \rho^r. \quad (4.3.9)$$

- quantidade de movimento do tipo R

$$\sum_{i=1}^{bm} R_i^0 \frac{h}{\delta} c_{i\alpha} = \rho^r u_\alpha, \quad (4.3.10)$$

onde  $\bar{u}$  é a velocidade física.

Agora, mudando-se a escala de observação na Eq. (4.3.1) para a qual a segunda ordem **também** é relevante, a Eq. (4.3.1) é re-escrita, em variáveis físicas, usando-se as informações da escala maior nas Eqs. (4.3.2.a - 4.3.2.b):

$$\begin{aligned} \partial_t R_i^0 + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha R_i^0 + \frac{h}{2L} \left[ \frac{\delta}{h} [\partial_t \Omega_i^{1r} + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha \Omega_i^{1r}] + 2\partial_t R_i^1 + 2\frac{\delta}{h} c_{i\alpha}^f \partial_\alpha R_i^1 \right] = \\ = \frac{h\Omega_i^{1r}}{\delta L} + h \frac{h\Omega_i^{2r}}{\delta L}. \end{aligned} \quad (4.3.11)$$

Devido às simetrias dos dois tipos de fluidos, a análise para o tipo B é análoga e obtém-se:

$$\begin{aligned} \partial_t B_i^0 + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha B_i^0 + \frac{h}{2L} \left[ \frac{\delta}{h} [\partial_t \Omega_i^{1b} + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha \Omega_i^{1b}] + 2\partial_t B_i^{1b} + 2\frac{\delta}{h} c_{i\alpha}^f \partial_\alpha B_i^{1b} \right] = \\ = \frac{h\Omega_i^{1b}}{\delta L} + h \frac{h\Omega_i^{2b}}{\delta L} \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

O operador de colisão  $\Omega_i^{1r}$  pode ser colocado em função de  $R_i^1$  usando-se as Eqs. (4.1.9) e (4.2.2); ver Eqs. (5.1.3) e (5.1.4). Neste momento do trabalho observa-se que se o fator de interação for considerado nulo, as expressões dadas pelas Eqs. (4.3.11-12) descreverão o comportamento de uma mistura de fluidos idealmente miscíveis, se for diferente de zero as Eqs. (4.3.11-12) descreverão o comportamento de uma mistura perturbada pela ação dos mediadores.

#### 4.4 – Operadores de colisão em Primeira ordem – Forma explícita

A expressão dada pela Eq. (4.3.4), re-escrita abaixo, será usada para determinar  $\Omega_i^{1r}$  como função dos gradientes de  $\rho^r$  e  $\rho^r \vec{u}$ . Por economia de notação usa-se aqui  $R_i^{eq}$  ao invés de  $R_i^{eq}(\rho^r, \rho^r \vec{u})$ .

$$\partial_t R_i^{eq} + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha R_i^{eq} = \frac{h\Omega_i^{1r}}{\delta L}. \quad (4.4.1)$$

Como o termo do lado direito da Eq. (4.4.1) é usado dentro do termo originalmente de ordem  $k_n$  na Eq. (4.3.10), na análise seguinte os termos da ordem de  $u^2$  serão desprezados.

As derivadas da distribuição de equilíbrio são obtidas com auxílio das relações abaixo:

$$\partial_t R_i^{eq}(\rho^r, \rho^r \bar{u}) = \left. \frac{\partial R_i^{eq}}{\partial \rho^r} \right|_{\rho^r \bar{u}} \partial_t \rho^r + \left. \frac{\partial R_i^{eq}}{\partial (\rho^r u_\beta)} \right|_{\rho^r} \partial_t (\rho^r u_\beta), \quad (4.4.2)$$

$$\partial_\alpha R_i^{eq}(\rho^r, \rho^r \bar{u}) = \left. \frac{\partial R_i^{eq}}{\partial \rho^r} \right|_{\rho^r \bar{u}} \partial_\alpha \rho^r + \left. \frac{\partial R_i^{eq}}{\partial (\rho^r u_\beta)} \right|_{\rho^r} \partial_\alpha (\rho^r u_\beta). \quad (4.4.3)$$

A forma explicita da distribuição de equilíbrio  $R_i^{eq}$  é a seguinte (ver seção 4.2):

$$R_i^{eq}(\rho^r, u) = \frac{\rho^r}{b} + \frac{D\rho^r}{b_m c^2} c_{i\alpha} u_\alpha + \frac{D(D+2)\rho^r}{2b_m c^4} c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\alpha u_\beta - \frac{D\rho^r}{2b_m c^2} (u_\alpha)^2. \quad (4.4.4)$$

$$R_o^{eq} = \frac{\rho}{b} b_r - \frac{\rho}{c^2} u^2. \quad (4.4.5)$$

Com isso, as derivadas nas Eqs. (4.4.2) e (4.4.3) são dadas por:

$$\frac{\partial R_i^{eq}}{\partial \rho^r} = \frac{1}{b} + O(u^2), \quad (4.4.6)$$

$$\frac{\partial R_i^{eq}}{\partial (\rho^r u_\beta)} = \frac{D}{b_m c^2} c_{i\alpha} + \frac{D(D+2)}{b_m c^4} c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\alpha - \frac{D}{b_m c^2} u_\beta. \quad (4.4.7)$$

Com a Eq. (4.3.5) e sua análoga para o tipo B, escrita abaixo, eliminam-se as derivadas temporais nas Eqs. (4.4.2) e (4.4.3):

$$\partial_t \rho^b = -\partial_\alpha (\rho^b u_\alpha^b), \quad (4.4.8)$$

$$\partial_t \rho = -\partial_\alpha (\rho u_\alpha). \quad (4.4.9)$$

Resta ainda determinar o termo  $\partial_t(\rho^r u_\beta)$  na Eq. (4.4.2). Tal termo desdobra-se na soma,

$$\partial_t(\rho^r u_\beta) = \rho^r \partial_t u_\beta + u_\beta \partial_t \rho^r = \rho^r \partial_t u_\beta + O(u^2), \quad (4.4.10)$$

e pode ser avaliado da equação de Euler, Eq. (4.3.7),

$$\partial_t(\rho u_\beta) = -\partial_\alpha \pi_{\alpha\beta}^0 = -\frac{b_m c^2}{bD} \partial_\alpha \rho \delta_{\alpha\beta} + O(u^2), \quad (4.4.11)$$

ou seja,

$$\rho \partial_t(u_\beta) + u_\beta \partial_t \rho = -\frac{b_m c^2}{bD} \partial_\beta \rho, \quad (4.4.12)$$

com isso,

$$\partial_t(u_\beta) = -\frac{1}{\rho} \left[ \frac{b_m c^2}{bD} \partial_\beta \rho \right] + O(u^2), \quad (4.4.13)$$

e finalmente:

$$\partial_t(\rho^r u_\beta) = \rho^r \partial_t u_\beta + u_\beta \partial_t \rho^r = -\frac{\rho^r}{\rho} \frac{b_m c^2}{bD} \partial_\alpha \rho \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.4.14)$$

Com tudo isso, obtém-se a forma explícita das derivadas na Eq. (4.4.1), que é o operador de colisão em primeira ordem e que será usado para se determinar  $R_i^1$  no próximo capítulo:

$$\begin{aligned} \Omega_i^{r,1}(\rho^r, u) = & \frac{\delta L}{bh} \left\{ -\partial_\alpha(\rho^r u_\alpha) + w^r u_\alpha \partial_\alpha \rho + (\partial_\alpha \rho^r - w^r \partial_\alpha \rho) c_{i\alpha} + \right. \\ & \left. + \left[ -\frac{(D+2)}{c^2} w^r u_\beta \partial_\alpha \rho + \frac{bD}{b_m c^2} \{ \partial_\alpha(\rho^r u_\beta) + u_\beta \partial_\alpha \rho^r \} \right] c_{i\alpha} c_{i\beta} \right\} + O(u^2). \end{aligned} \quad (4.4.15)$$

Na expressão anterior  $w^r = \frac{\rho^r}{\rho}$ . Analogamente para o tipo B tem-se:

$$\begin{aligned}
\Omega_i^{b,1}(\rho^b, u) = & \frac{\delta L}{bh} \left\{ -\partial_\alpha(\rho^b u_\alpha) + w^b u_\alpha \partial_\alpha \rho + (\partial_\alpha \rho^b - w^b \partial_\alpha \rho) c_{i\alpha} + \right. \\
& \left. + \left[ -\frac{(D+2)}{c^2} w^b u_\beta \partial_\alpha \rho + \frac{bD}{b_m c^2} \{ \partial_\alpha(\rho^b u_\beta) + u_\beta \partial_\alpha \rho^b \} \right] c_{i\alpha} c_{i\beta} \right\} + O(u^2). \quad (4.4.16)
\end{aligned}$$

## CAPÍTULO 5 - Resultados da análise de Chapman-Enskog

Neste capítulo são apresentadas as equações macroscópicas para o modelo proposto no capítulo 3. Na seção 5.1.a são apresentados os resultados da análise de Chapman-Enskog para os modelos miscível e imiscível, onde se encontram as equações de difusão e de Navier-Stokes juntamente com seus respectivos coeficientes de transporte. Na seção 5.2.b são apresentados os resultados da análise de Chapman-Enskog para o modelo imiscível, onde são obtidas expressões para a largura da interface, para a pressão normal à interface e para a tensão interfacial.

### 5.1 – Equações Macroscópicas

As expressões dadas pelas Eqs. (4.3.10-11) do capítulo anterior, re-escritas abaixo, nas quais as distribuições de equilíbrio são as de mistura  $R_i^{eq}(\rho^r, \bar{u})$  e  $B_i^{eq}(\rho^b, \bar{u})$  (seção 2 do capítulo 4), são agora o ponto de partida para a obtenção das equações macroscópicas para a massa e para a quantidade de movimento.

$$\begin{aligned} \partial_t R_i^{eq} + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha R_i^{eq} + \frac{h}{2L} \left[ \frac{\delta}{h} [\partial_t \Omega_i^{1r} + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha \Omega_i^{1r}] + 2\partial_t R_i^1 + 2\frac{\delta}{h} c_{i\alpha}^f \partial_\alpha R_i^1 \right] = \\ = \frac{h\Omega_i^{1r}}{\delta L} + h \frac{h\Omega_i^{2r}}{\delta L}, \end{aligned} \quad (5.1.1)$$

$$\begin{aligned} \partial_t B_i^{eq} + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha B_i^{eq} + \frac{h}{2L} \left[ \frac{\delta}{h} [\partial_t \Omega_i^{1b} + c_{i\alpha}^f \partial_\alpha \Omega_i^{1b}] + 2\partial_t B_i^1 + 2\frac{\delta}{h} c_{i\alpha}^f \partial_\alpha B_i^1 \right] = \\ = \frac{h\Omega_i^{1b}}{\delta L} + h \frac{h\Omega_i^{2b}}{\delta L}. \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

As informações sobre o tipo de interação entre as partículas do sistema são carregadas pelo operador de colisão em sua forma explícita, que para a primeira ordem de  $k_n$  são dadas pelas Eqs. (4.2.2-3), ou seja:

$$\begin{aligned} \Omega_i^{r,1} = & -\left(\frac{w^r}{\tau^r} + \frac{w^b}{\tau^m}\right)R_i^1 + \frac{D}{b_m c^2} \left(\frac{w^r}{\tau^r} - \frac{w^r}{\tau^m}\right) \left\{c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta}\right\} j_\alpha^{r,1} + \\ & - \frac{D}{b_m c^2} \frac{\rho w^b w^r}{\tau^m} \left\{c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta}\right\} v_\alpha^m \frac{A}{k_n}, \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

$$\begin{aligned} \Omega_i^{b,1} = & -\left(\frac{w^b}{\tau^b} + \frac{w^r}{\tau^m}\right)B_i^1 + \frac{D}{b_m c^2} \left(\frac{w^r}{\tau^r} - \frac{w^r}{\tau^m}\right) \left\{c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta}\right\} j_\alpha^{r,1} + \\ & - \frac{D}{b_m c^2} \frac{\rho w^b w^r}{\tau^m} \left\{c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta}\right\} v_\alpha^m \frac{A}{k_n}. \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

As duas expressões anteriores e as Eqs. (4.4.14-15) , permitem obter as distribuições de primeira ordem  $R_i^1(\rho^r, \bar{u})$  e  $B_i^1(\rho^b, \bar{u})$ :

$$\begin{aligned} R_i^1 = & -\frac{\tau^r \tau^m}{\tau^r w^b + \tau^m w^r} \left\{ -\frac{D}{b_m c^2} \left(\frac{w^r}{\tau^r} - \frac{w^r}{\tau^m}\right) j_\alpha^{r,1} \left[ c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right] + \right. \\ & + \frac{w^b w^r \rho}{\tau^m} \frac{D}{b_m c^2} \left[ c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right] v_\alpha^m \frac{A}{k_n} + \\ & + \frac{L}{b} \left[ -\partial_\alpha (\rho^r u_\alpha) + w^r u_\alpha \partial_\alpha \rho + (\partial_\alpha \rho^r - w^r \partial_\alpha \rho) c_{i\alpha} \right] + \\ & \left. + \frac{L}{b} \left[ -\frac{(D+2)}{c^2} w^r u_\beta \partial_\alpha \rho + \frac{bD}{b_m c^2} \{ \partial_\alpha (\rho^r u_\beta) + u_\beta \partial_\alpha \rho^r \} \right] c_{i\alpha} c_{i\beta} \right\}, \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

$$\begin{aligned} B_i^1 = & -\frac{\tau^b \tau^m}{\tau^b w^r + \tau^m w^b} \left\{ \frac{D}{b_m c^2} \left(\frac{w^b}{\tau^b} - \frac{w^b}{\tau^m}\right) j_\alpha^{r,1} \left[ c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right] \right. \\ & - \frac{w^b w^r \rho}{\tau^m} \frac{D}{b_m c^2} \left[ c_{i\alpha} - u_\alpha + \frac{D+2}{c^2} u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right] v_\alpha^m \frac{A}{k_n} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{L}{b} \left[ -\partial_\alpha (\rho^b u_\alpha) + w^b u_\alpha \partial_\alpha \rho + (\partial_\alpha \rho^b - w^b \partial_\alpha \rho) c_{ia} \right] + \\
& + \frac{L}{b} \left[ -\frac{(D+2)}{c^2} w^b u_\beta \partial_\alpha \rho + \frac{bD}{b_m c^2} \{ \partial_\alpha (\rho^b u_\beta) + u_\beta \partial_\alpha \rho^b \} \right] c_{ia} c_{i\beta} \Big\}. \quad (5.1.6)
\end{aligned}$$

A análise será feita para fluidos idealmente miscíveis onde o fator de interação  $A$  é igual a zero e para fluidos parcialmente miscíveis, ou imiscíveis, onde  $A$  é diferente de zero.

### 5.1.a – Fluidos Miscíveis

Ao somar as Eqs. (5.1.1) e (5.1.2) sobre todas as direções  $i$  da rede, obtém-se as formas macroscópicas das equações de conservação da massa para as espécies  $r$  e  $b$ , como os primeiros momentos das equações cinéticas. Quando antes de serem somadas nas direções, estas equações são multiplicadas por  $c_{i\beta}$ , obtém-se informações macroscópicas sobre o transporte da quantidade de movimento, ou o segundo momento das equações cinéticas. As informações que as equações (5.1.1) e (5.1.2) podem mostrar dependem da escala de observação usada no modelo.

1. Equações macroscópicas considerando os termos de ordem zero em  $k_n$ .

Para escalas suficientemente grandes pode-se desprezar os termos da ordem de  $k_n$  obtendo-se:

1.1 – Como primeiro momento, a equação de transporte da massa do tipo R e do tipo B:

$$\partial_t \rho^r + \partial_\alpha (\rho^r u_\alpha) = 0, \quad (5.1.a.1)$$

$$\partial_t \rho^b + \partial_\alpha (\rho^b u_\alpha) = 0. \quad (5.1.a.2)$$

1.2 – Como segundo momento, a equação de Euler para fluidos sem viscosidade:

$$\partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(p\delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) = 0, \quad (5.1.a.3)$$

onde a pressão  $p$  em unidades físicas, para fluido perfeito, é dada por,

$$p = \frac{h^2}{\delta^2} \frac{c^2}{(D+2)} \rho. \quad (5.1.a.4)$$

2. Equações macroscópicas considerando os termos de ordem 1 em  $k_n$ .

Para escalas pequenas o suficiente, considera-se agora (5.1.1) e (5.1.2) **até** a primeira ordem em  $k_n$  obtendo-se, em unidades físicas,

2.1 - Equação da difusão, em unidades físicas, como primeiro momento:

$$\partial_t \rho^r + \partial_\alpha(\rho^r u_\alpha) + \left\{ D_{diffu} \partial_\alpha \rho L \partial_\alpha \left( \frac{\rho^r}{\rho} \right) \right\} = 0. \quad (5.1.a.5)$$

Onde,  $u_\alpha = \frac{h}{\delta} u_\alpha$  e o coeficiente de difusão é dado por:

$$D_{diffu} = \left( \tau^m - \frac{1}{2} \right) \frac{c^2}{(D+2)} \frac{h^2}{\delta}. \quad (5.1.a.6)$$

2.2 – A equação de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos e incompressíveis para  $b_r = \frac{2b_m}{D}$ , como segundo momento, em unidades físicas:

$$\partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(p\delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) = \eta \rho \partial_\alpha (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) \quad (5.1.a.7)$$

O coeficiente de viscosidade cinemática em (5.1.a.7) é dado por<sup>1</sup>:

<sup>1</sup> Uma expressão simétrica e mais geral que a eq. (5.1.a.8) é dada na próxima seção na eq. (5.1.b.12).

$$\eta = -\frac{c^2}{(D+2)} \frac{h^2}{\delta} \left\{ \frac{C+B}{2(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)} \right\}. \quad (5.1.a.8)$$

Onde C e B são,

$$C = \rho^r \rho^b \tau^{m^2} + \rho^{r^2} \tau^b \tau^m + \rho^{b^2} \tau^r \tau^m + \rho^r \rho^b \tau^r \tau^b, \quad (5.1.a.9)$$

$$B = -2\rho^r \rho^b \tau^{m^2} (\tau^r + \tau^b) - 2\tau^r \tau^b \tau^m (\rho^{r^2} + \rho^{b^2}). \quad (5.1.a.10)$$

Pode-se verificar que no limite de fase pura do tipo R,  $\rho^b = 0$ , a Eq. (2.1.20) para a viscosidade da fase pura é recuperada. Neste caso os novos C e B são dados por,

$$C = \rho^{r^2} \tau^b \tau^m, \quad (5.1.a.11)$$

$$B = -2\tau^r \tau^b \tau^m \rho^{r^2}, \quad (5.1.a.12)$$

com isso, a Eq. (5.1.a.8) assume a nova forma abaixo:

$$\eta = -\frac{\delta c^2}{(D+2)} \left( \frac{h}{\delta} \right)^2 \left\{ \frac{\rho^{r^2} \tau^m \tau^b - 2\rho^{r^2} \tau^m \tau^r \tau^b}{2\rho^{r^2} \tau^m \tau^b} \right\}, \quad (5.1.a.13)$$

ou seja,

$$\eta = \frac{\delta c^2}{(D+2)} \left( \frac{h}{\delta} \right)^2 \left\{ \tau^r - \frac{1}{2} \right\}. \quad (5.1.a.14)$$

### 5.1.b – Fluidos Imiscíveis

A região de interesse em fluidos imiscíveis é a região da interface, a qual é representada por uma largura  $L$ . Tal largura é a menor escala na qual os gradientes de concentração são observados, por isso será essa a escala macroscópica de observação do LGB na análise de Chapman-Enskog. O campo de mediadores tem influência somente na região de interface, devido à exigência da conservação da quantidade de movimento total de um sítio (ver Eqs. (3.1.12-13)). Este campo atua em oposição à difusão de partículas, chegando a compensar totalmente a difusão quando então a interface torna-se estável. Como quem controla a intensidade com que os mediadores atuam sobre as partículas é o fator de interação  $A$ , a largura da interface deverá aumentar com a diminuição de  $A$  e diminuir com o aumento de  $A$ . No limite hidrodinâmico a largura da interface deve ser bem maior que o espaçamento entre os sítios da rede, o que implica em valores pequenos de  $A$ . Neste caso, a análise de Chapman-Enskog revela um termo ordenador, na equação de difusão, que não estava presente na equação de difusão para misturas; este termo aparece devido à ação dos mediadores. Na equação para a quantidade de movimento a pressão não sofre correção em primeira ordem e é do tipo gás perfeito, ainda aparecem dois termos curiosos: um deles é proporcional a corrente difusiva de massa em primeira ordem, o outro termo é um termo em forma de produto cruzado da velocidade do fluido e da velocidade dos mediadores. Medidas da pressão nas simulações, ao longo de uma interface plana e em repouso, apresentam quedas de pressão na direção tangencial a interface e pressão, ao longo da direção normal a interface, constante. Neste caso, acredita-se que a análise de Chapman-Enskog em primeira ordem, não foi suficiente para descrever a pressão na interface. Porém, usando-se um critério de estabilidade conseguiu-se a expressão analítica para a pressão que concorda com a simulação, numa interface plana e em repouso.

### Primeiro momento - Largura da Interface

Como primeiro momento da equação (5.1.1) obtém-se a equação de difusão modificada em unidades físicas:

$$\partial_t \rho^r + \partial_\alpha (\rho^r u_\alpha^r) + \frac{h}{2L} \partial_\alpha \left[ \sum_i c_{i\alpha}^f \Omega_i^{r,1} + 2 \sum_i c_{i\alpha}^f R_i^1 \right] = 0, \quad (5.1.b.1)$$

Para  $b_r = \frac{2b_m}{D}$ , ou seja, escoamento incompressível, ver (5.1.b.14), tem-se:

$$\sum_i c_{i\alpha}^f \Omega_i^{r,1} = \frac{c^{f^2}}{(D+2)} \frac{\delta L}{h} \rho \partial_\alpha w^r, \quad (5.1.b.2)$$

$$j_\alpha^{r,1} = \sum_i c_{i\alpha}^f R_i^1 = -w^r w^b \rho \frac{A^f}{k_n} v_\alpha^m - \frac{c^{f^2}}{(D+2)} \frac{\delta}{k_n} \tau^m \rho \partial_\alpha w^r, \quad (5.1.b.3)$$

e  $A^f = \frac{h}{\delta} A$ , com isso:

$$\partial_t \rho^r + \partial_\alpha (\rho^r u_\alpha^r) + \partial_\alpha \left[ \left( \frac{1}{2} - \tau^m \right) \frac{c^{f^2}}{(D+2)} \delta \rho \partial_\alpha w^r - w^b w^r \rho A^f v_\alpha^m \right] = 0. \quad (5.1.b.4)$$

O termo entre colchetes é a corrente difusiva macroscópica de massa do tipo R,  $j_\alpha^r$ ,

$$j_\alpha^r = (j_\alpha^r)^{Dif} + (j_\alpha^r)^{med}. \quad (5.1.b.5)$$

O primeiro termo da expressão anterior, e primeiro no colchetes da Eq. (5.1.b.4), tem a forma da Lei de Fick, onde o transporte de massa é devido aos gradientes de concentração  $w^r$ , em variáveis físicas:

$$(j_\alpha^r)^{Dif} = -\left( \tau^m - \frac{1}{2} \right) \frac{c^{f^2}}{(D+2)} \delta \rho \partial_\alpha w^r. \quad (5.1.b.6)$$

O segundo termo é o termo introduzido pelos mediadores:

$$(j_{\alpha}^r)^{med} = -(1 - w^r)w^r \rho A^f v_{\alpha}^m. \quad (5.1.b.7)$$

Como visto na seção 3.2, a anulação dos processos difusivos pela ação do campo de forças em contraposição à difusão fickiana é uma condição necessária para a estabilidade da interface. De fato, quando os processos de difusão associados a gradientes de concentração não são anulados pelas forças de campo na região de transição, a interface se torna mais e mais espessa e os fluidos R e B tendem a se misturar. Desse modo, uma interface estável deve satisfazer,

$$\left(\tau^m - \frac{1}{2}\right) \frac{c^f{}^2}{(D+2)} \delta \rho \partial_{\alpha} w^r = (1 - w^r)w^r \rho A^f v_{\alpha}^m. \quad (5.1.b.8)$$

Para o caso particular de uma interface plana, quando  $w^r$  varia somente com a coordenada  $y$ , lembrando também que  $\partial_y = \frac{\partial}{\partial y}$ ,  $A^f = \frac{h}{\delta} A$  e  $c^f = \frac{h}{\delta} c$ ,

$$dy = h \frac{c_s^2 \left(\tau^m - \frac{1}{2}\right)}{A} \frac{dw^r}{w^r(1 - w^r)}, \quad (5.1.b.9)$$

onde  $c_s^2 = \frac{c^2}{D+2}$  e com isso, a largura da interface torna-se um múltiplo de  $h$ ,

$$L = h \frac{c_s^2 \left(\tau^m - \frac{1}{2}\right)}{A} \int_{w_{ini}^r}^{w_{fin}^r} \frac{dw^r}{w^r(1 - w^r)}, \quad (5.1.b.10.a)$$

ou seja,

$$L = h \frac{c_s^2 \left(\tau^m - \frac{1}{2}\right)}{A} 2 \ln \left[ \frac{w_{fin}^r}{w_{ini}^r} \right] \quad (5.1.b.10.b)$$

quando a integral é feita desde uma concentração inicial de fluido do tipo R,  $w_{ini}^r$ , até uma concentração final  $w_{fin}^r$ . Este critério foi usado porque a probabilidade de uma partícula, do tipo R, ser encontrada infinitamente longe da interface, para ambos os lados, é sempre diferente de zero, o que torna a interface infinita. Como critério para se definir uma largura finita para a interface, foi escolhido a região limitada por uma concentração  $w_{ini}^r$  e uma  $w_{fin}^r$ .

### Segundo momento - Quantidade de movimento

Como segundo momento da equação (5.1.1), até a primeira ordem em  $k_n$ , obtém-se a equação para o transporte de quantidade de movimento, em unidades físicas:

$$\partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(\Pi_{\alpha\beta}^0) + \frac{h}{2L} \partial_\alpha \left[ \sum_i c_{i\alpha}^f c_{i\beta}^f (\Omega_i^{r,1} + \Omega_i^{b,1}) + 2 \sum_i c_{i\alpha}^f c_{i\beta}^f (R_i^1 + B_i^1) \right] = 0, \quad (5.1.b.11)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} & \partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(p \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha \{T(A^f)\} \\ & + \partial_\alpha \left\{ \rho \frac{\delta c^{f^2}}{(D+2)} \left[ \frac{1}{2} - \frac{\rho^r \tau^r \tau^m}{(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)} - \frac{\rho^b \tau^b \tau^m}{(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)} \right] (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (5.1.b.12)$$

onde  $p = \frac{c^{f^2}}{D+2} \rho$  é a pressão e o termo implícito  $T(A^f)$  é dado abaixo:

$$\begin{aligned} T(A^f) = & w^r w^b \rho \left[ \frac{\tau^r}{w^r \tau^m + w^b \tau^r} - \frac{\tau^b}{w^b \tau^m + w^r \tau^b} \right] (v_\alpha^m u_\beta + v_\beta^m u_\alpha) A^f + \\ & + \frac{h}{L\rho} (j_\alpha^{r,1} u_\beta + j_\beta^{r,1} u_\alpha) \left[ \frac{\tau^r \tau^m \left( \frac{\rho^r}{\tau^r} - \frac{\rho^r}{\tau^m} + \frac{\rho}{2\tau^m} \right)}{w^r \tau^m + w^b \tau^r} - \frac{\tau^b \tau^m \left( \frac{\rho^b}{\tau^b} - \frac{\rho^b}{\tau^m} + \frac{\rho}{2\tau^m} \right)}{w^b \tau^m + w^r \tau^b} \right]. \end{aligned} \quad (5.1.b.13)$$

O primeiro e o segundo termo são da ordem de  $AU$  e para pequenas velocidades pode ser desprezado. Além disso, o segundo termo de  $T(A^f)$  se anula para uma interface estável, quando  $j_\alpha^{r,1}$  deve ser nulo. Com isso, a equação para a quantidade de movimento torna-se idêntica à equação (5.1.a.8), com o mesmo coeficiente  $\eta$  de uma mistura ideal:

$$\partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha (p \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) = \eta \rho \partial_\alpha (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) \quad (5.1.b.14)$$

Para se obter o termo correto para os gradientes de velocidade na equação (5.1.b.14), houve a necessidade de se fazer a seguinte restrição sobre o número de partículas em repouso:

$$b_r = \frac{2b_m}{D} \quad (5.1.b.14a)$$

Tal restrição eliminou da equação (5.1.b.14) termos proporcionais ao divergente das velocidades, ou seja, os termos:

$$\left(1 - \frac{b_m(D+2)}{bD}\right) \partial_\alpha (\rho^r u_\alpha), \quad (5.1.b.14b)$$

$$\left(1 - \frac{b_m(D+2)}{bD}\right) \partial_\alpha (\rho^b u_\alpha), \quad (5.1.b.14c)$$

e com isso, fenômenos onde a compressibilidade seja importante não podem ser descritos por este modelo.

### Pressão Normal

Uma das conseqüências das regras de interação, Eqs. (4.2.3-4.2.4), é a diminuição das populações na direção tangente a interface e com a massa sendo conservada, estas populações são redirecionadas para a direção normal. Com isso, o fluxo da quantidade de movimento normal a interface é constante e igual à pressão hidrostática ( $c_s^2 \rho$ ) longe da interface, mas na direção tangente este fluxo é afetado pela queda de densidade. A análise de Chapman-Enskog em primeira ordem de  $k_n$  é insuficiente para que o termo de pressão descreva a situação anterior. Uma análise da situação de estabilidade da interface, na qual o termo correto de pressão é encontrado, mostra que a expansão deveria ir até a ordem dois em  $k_n$ , ou seja,  $R_i^2$  deve ser calculado, o que é uma tarefa enorme. Mas para uma interface plana em um fluido em repouso, consegue-se obter a pressão correta, o que permite encontrar uma tensão interfacial correta (que concorda com as simulações): admitindo-se a interface paralela ao eixo x com a fase do tipo R do lado direito da interface (y positivo), como abaixo:

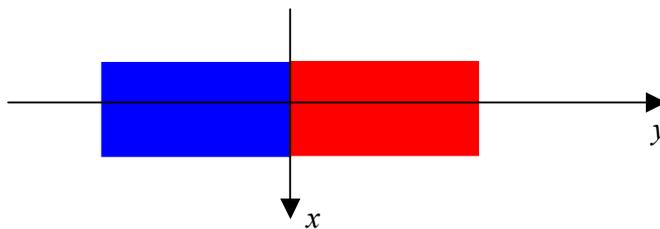


Figura 5.1.b.1 – orientação da interface

Quando a interface está estabilizada, tem-se,

$$v_y^m = -1 \quad \text{e} \quad v_x^m = 0. \quad (5.1.b.15)$$

Com estes valores, a variação da quantidade de movimento, num sítio da interface, no passo de colisão é dada por:

$$\vec{F}_y = \sum_i (R'_i - R_i) \vec{e}_{iy}. \quad (5.1.b.16)$$

Usando-se a Eq. (3.2.3) para o cálculo na Eq. (5.1.b.16) encontra-se:

$$\vec{F}_y = \frac{\rho^r \rho^b}{\rho \tau^m} \{u_y^b - u_y^r - A v_y^m\} \hat{j} \quad (5.1.b.17)$$

Ainda, como a colisão inverte a quantidade de movimento na direção  $y$ :

$$\vec{F}_y = 2\rho^r |u_y^r| \hat{j}. \quad (5.1.b.18)$$

Ou seja, das Eqs. (5.1.b.17-18) e da igualdade  $\rho^r u^r = -\rho^b u^b$  (interface em repouso) obtém-se finalmente a relação entre a velocidade de cada fase e o campo de mediadores, levando em conta que antes da colisão as partículas fogem da sua cor ( $u^b > 0$  e  $u^r < 0$ ):

$$u_y^r = \frac{\rho^b A v_y^m}{(1 - 2\tau^m)\rho} \quad (5.1.b.19)$$

$$u_y^b = -\frac{\rho^r A v_y^m}{(1 - 2\tau^m)\rho} \quad (5.1.b.20)$$

Com a solução da equação de Boltzmann para o caso imiscível, quando a interface está estabilizada,  $R_i^*$  e  $B_i^*$  nas Eqs. (3.2.5-3.2.6), a “pressão normal”,  $\pi_{yy}$ , e a “pressão tangencial”,  $\pi_{xx}$ , são dadas por:

$$\begin{aligned} \pi_{yy} = & \sum_i (R_i^* + B_i^*) c_{iy} c_{iy} = \frac{\rho^r \tau^m}{(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)} [c_s^2 \rho^r \delta_{\alpha\beta} + \rho^r u_\alpha^r u_\beta^r] + \\ & + \frac{\rho^b \tau^r}{(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)} [c_s^2 \rho^r \delta_{\alpha\beta} + \rho^r u_\alpha^b u_\beta^b - A \rho^r (u_\alpha^b v_\beta^m + u_\beta^b v_\alpha^m) + A^2 \rho^r v_\alpha^m v_\beta^m] + \\ & + \left\{ \frac{\rho^r \tau^r \tau^m}{(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)} - \frac{\rho^b \tau^b \tau^m}{(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)} \right\} \sum_i (R_i^* - R_{-i}^*) c_{i\alpha} c_{i\beta} + \\ & + \frac{\rho^b \tau^m}{(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)} [c_s^2 \rho^b \delta_{\alpha\beta} + \rho^b u_\alpha^b u_\beta^b] + \\ & + \frac{\rho^r \tau^b}{(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)} [c_s^2 \rho^b \delta_{\alpha\beta} + \rho^b u_\alpha^r u_\beta^r + A \rho^b (u_\alpha^r v_\beta^m + u_\beta^r v_\alpha^m) + A^2 \rho^b v_\alpha^m v_\beta^m]. \quad (5.1.b.21) \end{aligned}$$

Ou seja, usando também  $u_x^r = u_x^b = 0$ , encontra-se:

$$\pi_{yy} = c_s^2 \rho + \frac{\rho^r \rho^b A^2}{(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)(1-2\tau^m)} \left\{ \frac{\rho^r \rho^b \tau^m + \rho^r \rho^r \tau^r}{(1-2\tau^m)\rho^2} - \frac{2\rho^r \tau^r}{\rho} + \tau^r (1-2\tau^m) \right\} \\ + \frac{\rho^r \rho^b A^2}{(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)(1-2\tau^m)} \left\{ \frac{\rho^r \rho^b \tau^m + \rho^b \rho^b \tau^b}{(1-2\tau^m)\rho^2} - \frac{2\rho^b \tau^b}{\rho} + \tau^b (1-2\tau^m) \right\}, \quad (5.1.b.22)$$

$$\pi_{xx} = c_s^2 \rho. \quad (5.1.b.23)$$

A correção no termo  $c_s^2 \rho$  em  $\pi_{yy}$  é proporcional a  $A^2$ , ou seja, é uma correção de ordem  $k_n^2$ .

### Tensão Interfacial

A tensão interfacial  $\sigma$  é obtida de sua definição mecânica [Rothman e Zaleski 1997], pela integral, na direção  $y$  (normal a interface paralela ao eixo  $x$ ), e em todo o domínio  $y$ , da diferença entre  $\pi_{yy}$  e  $\pi_{xx}$ :

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} [\pi_{yy}(y) - \pi_{xx}(y)] dy. \quad (5.1.b.24)$$

No espaço das concentrações a tensão interfacial, em unidades físicas, é dada por:

$$\sigma = h \frac{c_s^2 (\tau^m - .5)}{A} \int_0^1 (\pi_{yy}(w^r) - \pi_{xx}(w^r)) \frac{dw^r}{w^r (1-w^r)}. \quad (5.1.b.25)$$

Na expressão acima as novas quantidades  $\Pi_{yy}(w^r)$  e  $\Pi_{xx}(w^r)$  são obtidas expressando-se  $\rho$  como  $\rho(w^r)$  e para isso, usa-se a condição assintótica abaixo, onde  $\rho_{ini}$  é a densidade muito longe da interface:

$$\Pi_{yy} = c_s^{f^2} \rho + \rho A^{f^2} a_r a_{r1} + \rho A^{f^2} a_b a_{b1} = c_s^{f^2} \rho_{ini}. \quad (5.1.b.26)$$

onde,

$$a_r = \frac{\rho^r \rho^b}{(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)(1 - 2\tau^m)}, \quad (5.1.b.27)$$

$$a_b = \frac{\rho^r \rho^b}{(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)(1 - 2\tau^m)}, \quad (5.1.b.28)$$

$$a_{r1} = \frac{\rho^r \rho^b \tau^m + \rho^r \rho^r \tau^r}{(1 - 2\tau^m) \rho^2} - \frac{2\rho^r \tau^r}{\rho} + \tau^r (1 - 2\tau^m), \quad (5.1.b.29)$$

$$a_{b1} = \frac{\rho^r \rho^b \tau^m + \rho^b \rho^b \tau^b}{(1 - 2\tau^m) \rho^2} - \frac{2\rho^b \tau^b}{\rho} + \tau^b (1 - 2\tau^m). \quad (5.1.b.30)$$

Com isso, a densidade é dada por:

$$\rho = \frac{c_s^2 \rho_{ini}}{(c_s^2 + A^2 a_r a_{r1} + A^2 a_b a_{b1})}. \quad (5.1.b.31)$$

A tensão interfacial é então calculada pela seguinte expressão:

$$\sigma = \frac{h^3}{\delta^2} c_s^4 (\tau^m - .5) \rho_{ini} A \int_0^1 \frac{(a_r a_{r1} + a_b a_{b1})}{(c_s^2 + A^2 a_r a_{r1} + A^2 a_b a_{b1})} \frac{dw^r}{w^r (1 - w^r)}. \quad (5.1.b.32)$$

No entanto, foi usada no integrando o elemento  $dy$  na Eq. (5.1.b.9), obtido pelo método de Chapman-Enskog em primeira ordem, ou seja, com a primeira potência do fator de interação, sendo assim, a forma correta para a Eq. (5.1.b.32) é a seguinte:

$$\sigma = \frac{h^3}{\delta^2} c_s^2 (\tau^m - .5) \rho_{ini} A \int_0^1 (a_r a_{r1} + a_b a_{b1}) \frac{dw^r}{w^r (1 - w^r)}. \quad (5.1.b.33)$$

## Capítulo 6 – Resultados de Simulação

Neste capítulo são apresentadas as maneiras como foram medidas a difusividade, viscosidade, pressão normal e tangencial, largura de interface e tensão interfacial, bem como os resultados obtidos da simulação numérica do modelo proposto no capítulo 3. Estes resultados são comparados com aqueles previstos pela análise de Chapman-Enskog.

### 6.1 Fluidos idealmente miscíveis – difusividade

O valor da difusividade  $D_{difu}$  na Eq. (6.1.1), dado pela Eq. (5.1.a.6), pode ser comparada com o valor extraído de uma simulação numérica [Flekkøy 1993]. No trabalho de Flekkøy uma caixa de largura infinita é preenchida, ao longo da largura, com densidades de partículas distribuídas de maneira senoidal, como na figura 6.1.1.

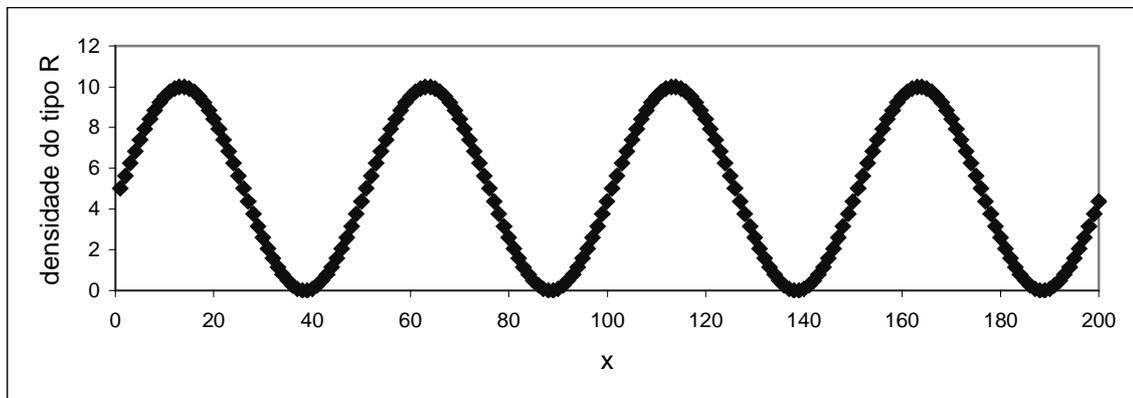


Figura 6.1.1 – Condição inicial para a simulação que gerou o resultado da figura 6.1.2

As fases R e B ficam separadas em regiões periódicas, as quais tendem a misturar-se com a evolução temporal. Uma expressão matemática para o coeficiente de difusão, em função dessa condição inicial, pode ser obtido partindo-se da equação da difusão com densidade  $\rho$  e velocidade da mistura  $u_\alpha$  constantes,

$$\partial_t C_r + u_\alpha \partial_\alpha C_r = D_{difu} \partial_{\alpha\alpha} C_r, \quad (6.1.1)$$

onde  $C_r$  é a concentração de partículas do tipo  $R$ , uma solução da Eq. (6.1.1) quando  $\vec{u} = \vec{u}_x$  é paralelo ao gradiente de concentração,  $\partial_x$ , é a seguinte:

$$C_r(x,t) = \frac{1}{2} C_{\max} \left[ 1 + e^{-k_s^2 D_{\text{dif}} t} \sin(k_s x - k_s u t) \right]. \quad (6.1.2)$$

Onde  $k_s$  é o número de onda e  $C_{\max}$  a concentração máxima. No instante inicial,  $t = 0$ , a concentração distribui-se como uma função seno sobre o domínio  $[-\infty, +\infty]$  em  $x$ :

$$C_r(x,0) = \frac{1}{2} C_{\max} [1 + \sin(k_s x)]. \quad (6.1.3)$$

A amplitude da onda em  $C_r(x,t)$ , Eq. (6.1.2), decai com o tempo até o valor constante  $\frac{C_{\max}}{2}$ . O coeficiente de difusão  $D_{\text{dif}}$  pode ser obtido do decaimento da área  $A(t)$ , contida entre o eixo  $x$  e a curva definida pela função  $f(x,t)$  abaixo:

$$f(x,t) = \left| C_r(x,t) - \frac{C_{\max}}{2} \right| \frac{1}{C_{\max}}, \quad (6.1.4)$$

a qual usando a Eq. (6.1.2) escreve-se como,

$$f(x,t) = \frac{1}{2} e^{-k_s^2 D_{\text{dif}} t} |\sin(k_s x - k_s u t)|. \quad (6.1.5)$$

A área  $A(t)$  entre  $f(x,t)$  e o eixo  $x$  é definida por:

$$A(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(x,t) dx. \quad (6.1.6)$$

Usando-se a Eq. (6.1.5) pode-se escrever:

$$A(t) = \frac{e^{-k_s^2 D_{\text{dif}} t}}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\sin(k_s x - k_s u t)| dx. \quad (6.1.7)$$

Com isso, no instante inicial:

$$A(0) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(x,0)dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\sin(k_s x)| dx. \quad (6.1.8)$$

A difusividade é conseguida da relação  $\frac{A(0)}{A(t)}$ , quando é usada a mudança para a variável

$y = x - ut$  na Eq. (6.1.7):

$$A(t) = \frac{e^{-k_s^2 Dt}}{2} \int_{-\infty-ut}^{\infty-ut} |\sin(k_s y)| dy = A(0) e^{-k^2 D_{difu} t}, \quad (6.1.9)$$

ou seja,

$$D_{difu} = \frac{1}{k_s^2 t} \ln \left\{ \frac{A(0)}{A(t)} \right\}. \quad (6.1.10)$$

A partir de uma simulação pode-se obter  $A(t)$  e  $A(0)$  usando-se a  $f(x,t)$  dada pela expressão (6.1.4) e  $A(t)$  dada pela expressão (6.1.6) para o caso discreto:

$$A(t) = \sum_{x=-L}^{+L} \left| C_r(x,t) - \frac{C_{\max}}{2} \right| \frac{1}{C_{\max}}, \quad (6.1.11)$$

onde as condições de contorno são periódicas na direção  $x$  e as condições iniciais são dadas pela Eq. (6.1.3). No instante inicial então:

$$A(0) = \sum_{x=-L}^{+L} \left| C_r(x,0) - \frac{C_{\max}}{2} \right| \frac{1}{C_{\max}}. \quad (6.1.12)$$

Com isso a difusividade é encontrada com a Eq. (6.1.10). Na figura 6.1.2 mostra-se um resultado de simulação onde foi usado  $C_{\max} = 1$  e  $k_s = 4$ , para uma rede de 200 sítios na

direção  $x$  e 100 na direção  $y$ , densidade 10 e tempos de relaxação  $\tau^r = \tau^b = 1$  e  $\tau^m = 2$ . As condições de contorno são periódicas nas duas direções e a condição inicial é uma distribuição tipo seno, como na figura 6.1.1.

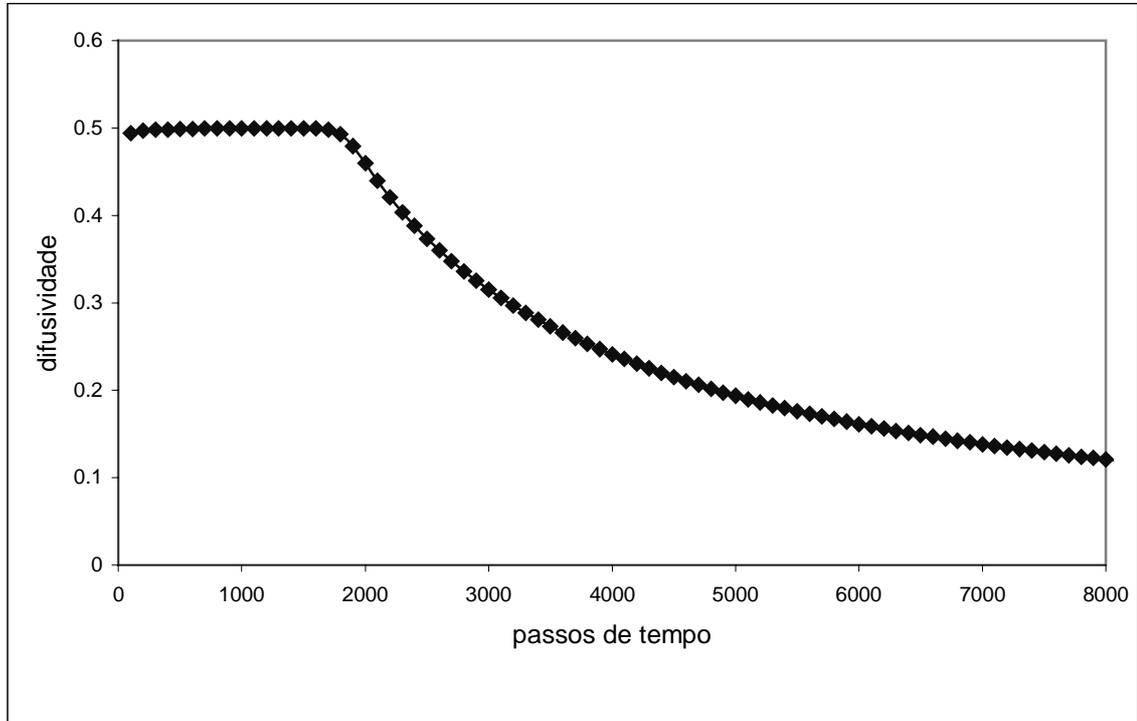


Figura 6.1.2 – Medida da difusividade numa simulação numérica do modelo proposto no capítulo 3. O

resultado previsto pela expressão (5.1.a.6) é  $D = \frac{1}{2}$ .

Nos primeiros 2000 passos de tempo do resultado na figura 6.1.2 existe ótima concordância dos valores simulados com o previsto pela Eq. (5.1.a.6). A partir daí deixa de haver concordância, isto porque num tempo infinito a solução analítica dada pela Eq. (6.1.2) é exatamente  $C_r(x, t) = \frac{1}{2} C_{\max}$ , mas numericamente existe erro de truncamento numa variável do tipo float, a qual representa uma variável real, com isso existe um resíduo  $A(t = \infty) \neq 0$  e a difusividade tende a zero:

$$D = \frac{1}{k_s^2 t} \ln \left\{ \frac{A(0)}{A(t)} \right\} \rightarrow \frac{1}{\infty} \ln \left\{ \frac{A(0) = cte}{A(\infty) = \text{soma dos erros} = (cte \neq 0)} \right\} \rightarrow 0, \quad (6.1.13)$$

Neste caso, o processo de difusão, devido aos gradientes macroscópicos de concentração inicial, deixa de existir, para dar lugar a uma mistura em equilíbrio.

Na tabela 6.1.1 abaixo são apresentados alguns valores de difusividade obtidos com o método descrito nesta seção. A rede usada foi a mesma que originou os resultados da figura 6.1.2.

Difusividade		$\tau^r$	$\tau^b$	$\tau^m$
Simulada	Teórica			
0.166669	0.166667	1	1	1
0.331565	0.333333	1	3	1.5
0.329481	0.333333	3	6	1.5
0.81903	0.833333	1	3	3

Tabela 6.1.1 – Valores de difusividade para diversos tempos de relaxação

Para valores baixos dos tempos de relaxação  $\tau^r$  e  $\tau^b$ , os patamares semelhantes aos da figura 6.1.2 são grandes e os resultados analíticos concordam mais com os valores simulados. Para valores maiores destes tempos os patamares são menores e para valores maiores ainda, o patamar não se forma. Usando-se o método apresentado no trabalho de Flekkøy, a medida da difusividade é influenciada pelos tempos de relaxação  $\tau^r$  e  $\tau^b$ .

## 6.2 Fluidos idealmente miscíveis – viscosidade

O valor da viscosidade  $\nu$  dado pela Eq. (5.1.a.8) pode ser comparado com o valor extraído de uma simulação numérica para o caso do escoamento entre placas planas e paralelas. Neste caso, em regime permanente, é esperado um perfil parabólico de velocidades e devido a simetria do problema na direção  $z$  usa-se a equação de Navier-Stokes 2-D, para a densidade  $\rho$  e a viscosidade  $\mu$  constantes:

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 u(y)}{\partial y^2}, \quad (6.2.1)$$

onde as placas são consideradas paralelas ao eixo  $x$ , a velocidade na direção  $x$  é  $u$ , nas direções  $y$  e  $z$  as velocidades macroscópicas são consideradas nulas.

Admitindo que em regime permanente a velocidade  $u$  não varia com a direção  $x$ , a Eq. (6.2.1) torna-se:

$$\frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial^2 u(y)}{\partial y^2}, \quad (6.2.2)$$

a qual integrada na variável  $x$  torna-se,

$$\frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} y + r_1 = \frac{\partial u(y)}{\partial y}. \quad (6.2.3)$$

Integrando-se mais uma vez:

$$\frac{\partial p}{\partial x} \frac{y^2}{2\mu} + r_1 y + r_2 = u(y). \quad (6.2.4)$$

As constantes de integração  $r_1$  e  $r_2$  são determinadas usando-se as seguintes condições de contorno:  $u(y=0) = 0$  e  $u(y=H) = 0$ , onde  $H$  é a distância entre as placas.

Com isso,  $r_2 = 0$  e  $r_1 = -\frac{H}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x}$ , sendo a viscosidade então dada por:

$$\mu = \frac{1}{2u(y)} \frac{\partial p}{\partial x} y[y-H]. \quad (6.2.5)$$

Para o ponto  $y = \frac{H}{2}$  e usando  $\mu = \rho\eta$ , tem-se:

$$\eta = -\frac{H^2}{8\rho u(H/2)} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (6.2.6)$$

Nas simulações, o gradiente de pressão é avaliado por  $\frac{\Delta p}{\Delta x}$ , onde a pressão pode ser dada por  $p = c_s^2 \rho$ :

$$\frac{\partial p}{\partial x}(x) \cong \frac{c_s^2 [\rho(x + \Delta x) - \rho(x - \Delta x)]}{2\Delta x} \quad (6.2.7)$$

Para os parâmetros do modelo totalmente miscível (fator de interação nulo),  $\tau^r = \tau^b = 1$  e  $\tau^m = 2$ , obteve-se o perfil de velocidades da figura 6.1.1. O valor de viscosidade cinemática encontrado usando-se a Eq. (6.2.6) e fazendo-se uma média aritmética numa linha inteira de sítios foi  $\eta = 0.13323$ , enquanto que o valor previsto analiticamente dada pela Eq. (5.1.a.8) foi  $\eta = 0.13888$ . A diferença entre esses valores diminui com o aumento do número de sítios entre as placas.

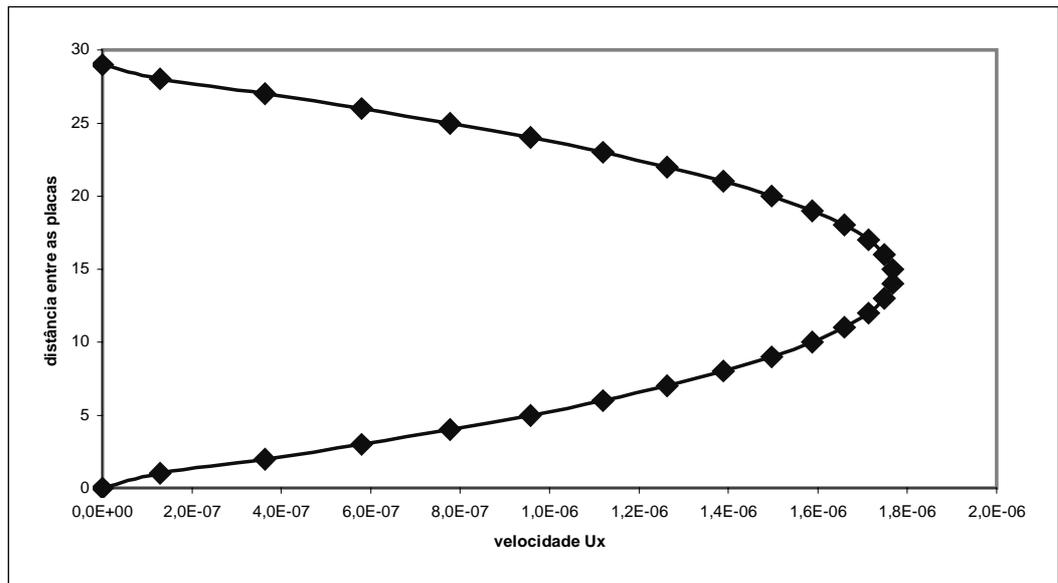


Figura 6.2.1 – Perfil parabólico de velocidades numa simulação de escoamento bifásico (mistura) entre placas planas e paralelas: a rede usada é a FCHC (D3Q19) com 400x30x3 sítios e a condição de contorno nas paredes, em  $y = 0$  e  $y = 29$ , é de não-escorregamento (*bounce-back*)

Na tabela 6.2.1 são apresentados, para alguns tempos de relaxação os respectivos valores de viscosidade, obtidos com o método descrito acima. A rede usada foi a mesma que gerou os resultados da figura 6.2.1.

Viscosidade		$\tau_r$	$\tau_b$	$\tau_m$
Simulada	Teórica			
0.172615	0.166667	1	1	1
0.370507	0.366667	1	3	1.5
0.561238	0.566667	3	6	1.5
0.559141	0.583333	1	3	3

Tabela 6.2.1 – Valores de viscosidade para vários tempos de relaxação.

Os resultados mostram uma boa concordância entre a análise de Chapman-Enskog e a simulação.

### 6.3 - Fluidos imiscíveis - pressão

Uma medida das pressões normal e tangencial é apresentada no gráfico da figura 6.3.1. Foram usados 4 mil passos de simulação na rede FCHC, os tempos de relaxação são  $\tau^r = \tau^b = 1$  e  $\tau^m = 2$ , o número de sítios da rede é  $100 \times 100 \times 3$ , o fator de interferência  $A$  usado foi  $\frac{1}{2}$ . A rede foi inicialmente preenchida com 10 “partículas” por sítio de maneira que na metade esquerda da rede somente com partículas do tipo B, e na metade direita com fluido do tipo R, como na figura 6.3.1. As condições de contorno são: sólido na direita e na esquerda, e periodicidade nos outros lados. Os valores de pressão normal e tangencial obtidos a partir das Eqs. (5.1.b.22-5.1.b.23) respectivamente, são representados no gráfico por Pn\_analise e Pt\_analise. Os valores de pressão normal e tangencial medidos da simulação são dados por Pn\_medido e Pt\_medido.

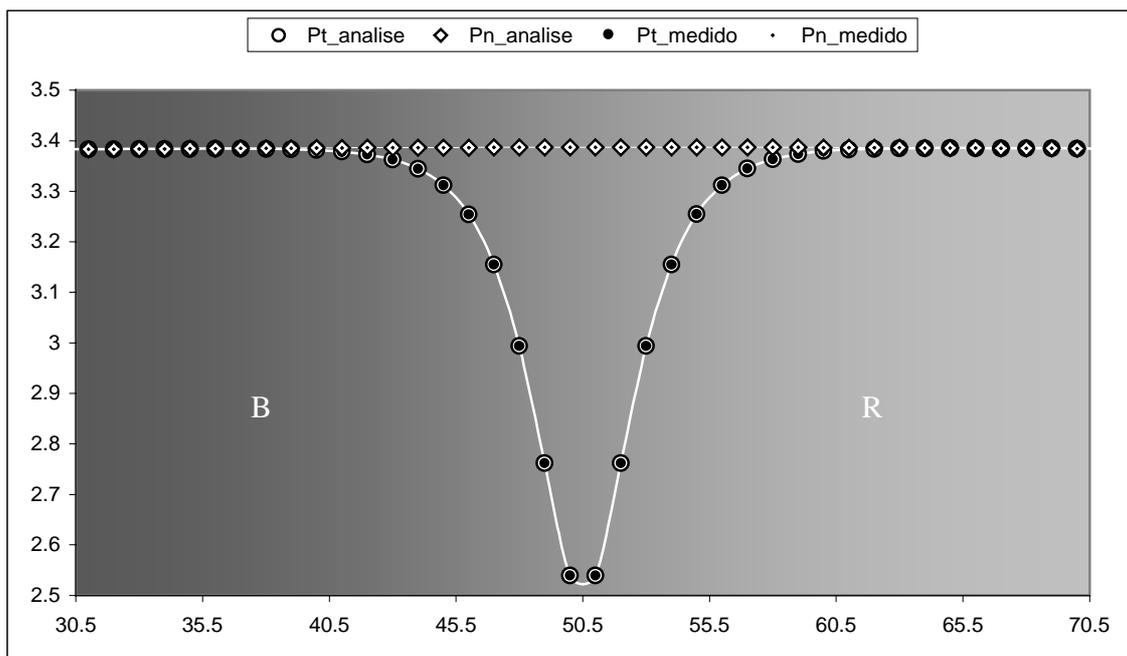


Figura 6.3.1 – Pressões normal e tangencial à interface de separação entre o fluido azul B e o vermelho R.

Em regiões longe da interface o efeito dos mediadores não é sentido e as pressões normal e tangencial tem o mesmo valor. O mesmo não acontece próximo à interface onde a difusão compete com o efeito dos mediadores gerando a diferença entre as pressões. Os resultados de simulação confirmam então a análise teórica.

### 6.4 Fluidos imiscíveis - largura da interface

O nível que o modelo atinge, na descrição da “realidade” da junção de dois fluidos imiscíveis, permite compreender a interface de separação entre os fluidos como sendo uma região onde estão presentes as duas fases. Na figura 6.4.1 pode-se observar um *degradé* entre a fase totalmente azul e a totalmente vermelha. Neste *degradé* estão presentes as duas fases com concentrações que variam de maneira conhecida, já que, na condição de estabilidade da interface os fluxos difusivos devem se anular (ver seção 5.1.b).

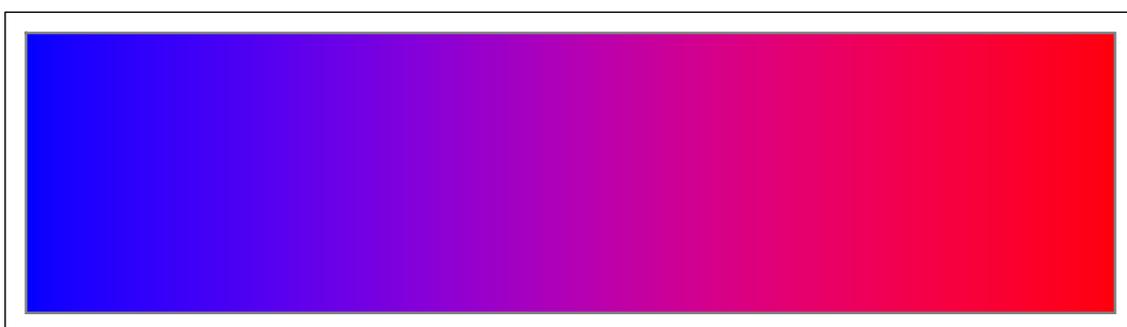


Figura 6.4.1 – A região degradé entre a fase pura azul e a fase pura vermelha é a interface de separação entre elas.

Um exemplo da distribuição de massa percentual de cada fase, através da interface, é mostrado na figura 6.4.2.

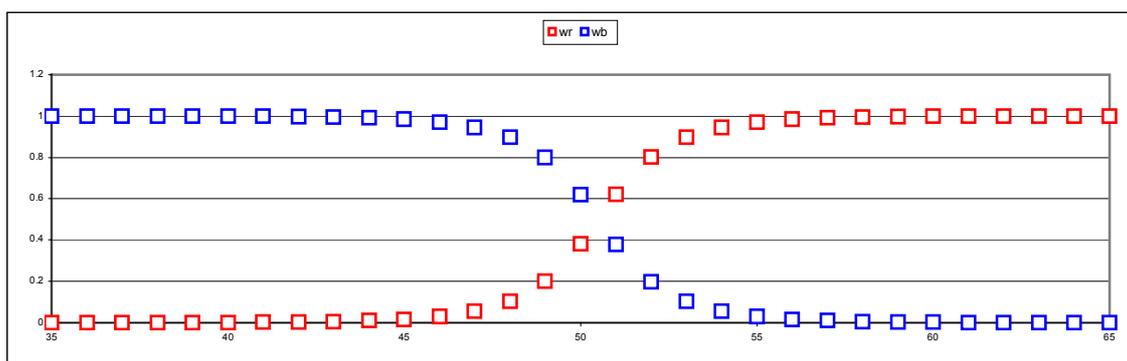


Figura 6.4.2 – Concentrações das fases azul e vermelha ao longo do domínio y perpendicular à interface, para  $A = 0.5$ .

A previsão de largura da interface é obtida pela Eq. (5.1.b.10.b). Usando-se as mesmas concentrações  $w_{ini}^r$  e  $w_{fin}^r$  da integral acima, procura-se o valor correspondente da distância entre estes dois pontos nos valores simulados. Para o caso dos 10000 passos de simulação, numa rede com dimensões 100x100x3 e que originou a figura 6.4.2, onde  $\tau^m = 2$ ,  $\tau^r = \tau^b = 1$ ,  $\rho_{ini} = 10$ ,  $A = 0.5$ ,  $w_{ini}^r = 0.001$ ,  $w_{fin}^r = .999$  os resultados obtidos foram os seguintes (em unidades de rede):

Largura da Interface analítica = 13.81

Largura da Interface simulação = 21

Para o caso de mudar-se somente o fator de interação  $A$  para 0.1, obtem-se excelente concordância:

Largura da Interface analítica = 69.067

Largura da Interface simulação = 70

Neste caso, as concentrações são mostradas na figura 6.4.3.

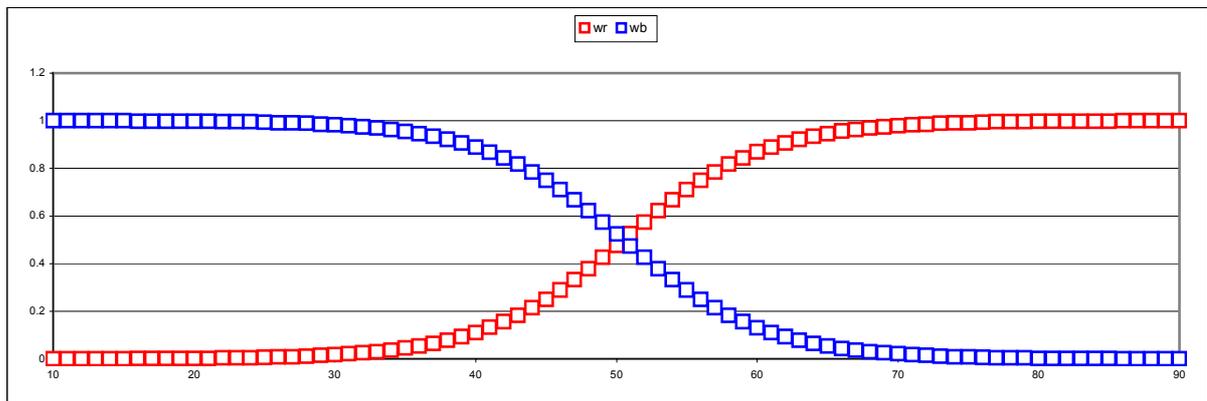


Figura 6.4.3 – Concentrações das fases azul e vermelha ao longo do domínio y perpendicular à interface, para  $A = 0.1$ .

A medida da largura da interface, como foi definida, concorda mais com os resultados analíticos para menores valores do fator de interação  $A$ , como já era esperado devido às aproximações feitas no capítulo 4. O comportamento da largura da interface com o fator de interação, também era esperado, ou seja, para um fator  $A$  pequeno a força exercida sobre as partículas é menor e estas poderão ir mais longe na interface. Para um valor de  $A$  pequeno, a largura da interface, então, deve ser grande e vice-versa.

### 6.5 Fluidos imiscíveis - tensão interfacial

A expressão dada pela Eq. (5.1.b.33) foi encontrada assumindo-se uma interface plana estável, o resultado simulado neste caso foi conseguido somando-se a diferença ( $\pi_{yy} - \pi_{xx}$ ) através do domínio perpendicular,  $y$ , à interface, ou seja, usando-se a expressão dada pela Eq. (5.1.b.24), o valor simulado/analítico usa os valores simulados de  $\rho^r, \rho^b$  para contabilizar a diferença entre  $\pi_{yy}$  e  $\pi_{xx}$ , os quais são dados pelas Eqs. (5.1.b.22-5.1.b.23). As evoluções dos valores simulado e simulado/analítico são mostrados em duas partes nas figuras (6.5.1) e (6.5.2), onde os parâmetros usados foram:  $\tau^m = 2$ ,  $\tau^r = \tau^b = 1$ ,  $\rho_{ini} = 10$ , *rede* 100x100x3, 10000 *passos*,  $A = 0.5$ . As condições de contorno são periódicas na direção  $x$  (tangente à interface) e *bounce-back* nas extremidades na direção  $y$ . Inicialmente os fluidos estão completamente separados e as oscilações são devido às ondas de pressão criadas pela condição inicial.

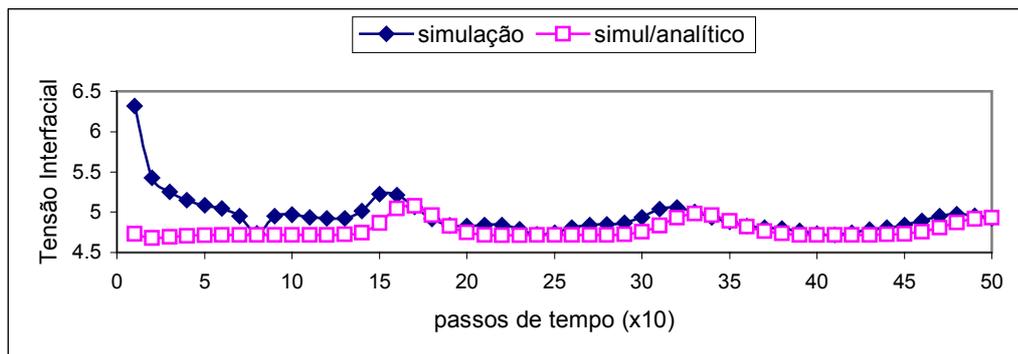


Figura 6.1.1 – Evolução temporal da tensão interfacial, primeiros 500 passos.

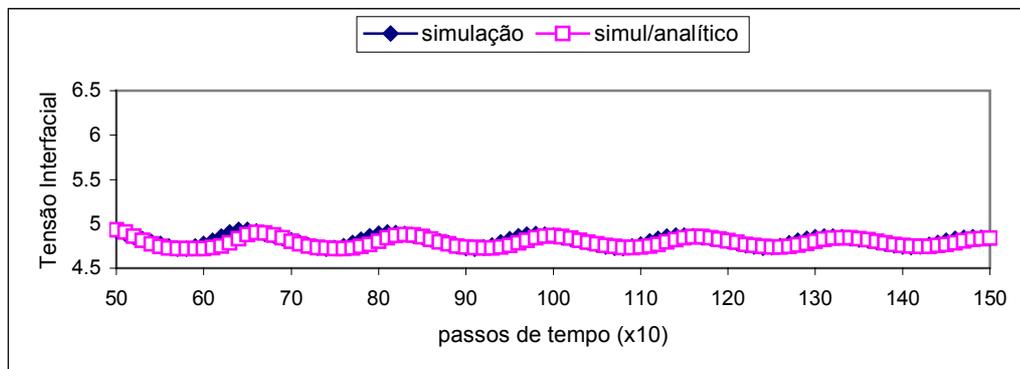


Figura 6.1.2 – Evolução temporal da tensão interfacial, segunda parte.

A figura (6.5.3) mostra resultados de tensão interfacial para vários valores de  $A$ , onde os parâmetros abaixo foram mantidos fixos:  $\tau^m = 1.5$ ,  $\tau^r = 1$ ,  $\tau^b = 3$ ,  $\rho_{ini} = 10$ ,  $rede\ 100 \times 100 \times 3$ ,  $10000\ passos$ . Os valores analíticos foram obtidos com a Eq. (5.1.b.33).

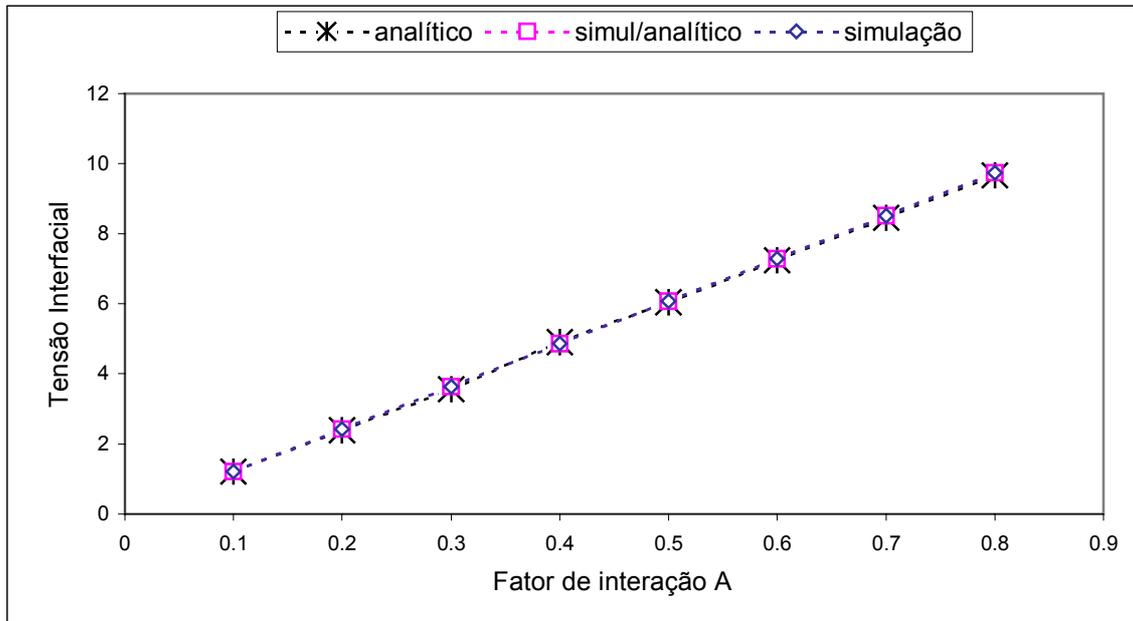


Figura 6.5.3 – Tensão interfacial para vários valores de  $A$ .

Para o valor  $A = 0.9$  e maiores a simulação diverge, ou seja, encontra-se valores negativos para  $R_i$  e  $B_i$ .

Para interfaces curvas, pode-se usar uma câmara redonda (2D) com *bounce-back* nas extremidades, onde uma bolha de raio  $r$  é dada como condição inicial no centro câmara.

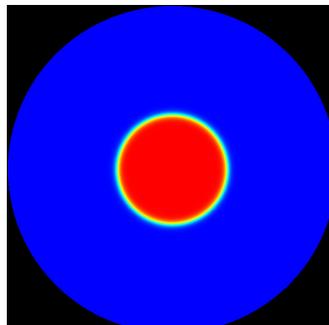


Figura 6.5.4 – Bolha de fluido do tipo R para medida da tensão interfacial.

O raio da bolha depende do fator de interação  $A$ ; usando-se a Lei de Laplace, Eq. (6.5.1), a tensão interfacial pode ser obtida como a inclinação da reta  $\Delta P \times r$  para vários  $r$ , como mostrado na figura (6.5.4).

$$\sigma = r\Delta P, \quad (6.5.1)$$

onde  $\Delta P$  é a diferença de pressão dentro e fora da bolha do tipo R.

O critério para o raio da bolha depende da largura da interface, que neste caso foi escolhida entre as concentrações  $w_{ini}^r = 0.999$  e  $w_{fin}^r = 0.001$ , dessa maneira defini-se o raio da bolha como:

$$r = x(w_{ini}^r) + \frac{x(w_{fin}^r) - x(w_{ini}^r)}{2}, \quad (6.5.2)$$

onde  $x(w_{ini}^r)$  é a posição onde a concentração  $w^r$  atinge o valor  $w_{ini}^r$ . A pressão interna é avaliada no centro da bolha e a externa longe do centro da bolha. Os parâmetros usados são:

$\tau^m = 1.5$ ,  $\tau^r = 1$ ,  $\tau^b = 3$ ,  $\rho_{ini} = 10$ , rede 200x200 (D2Q9),  $A = 0.4$ .

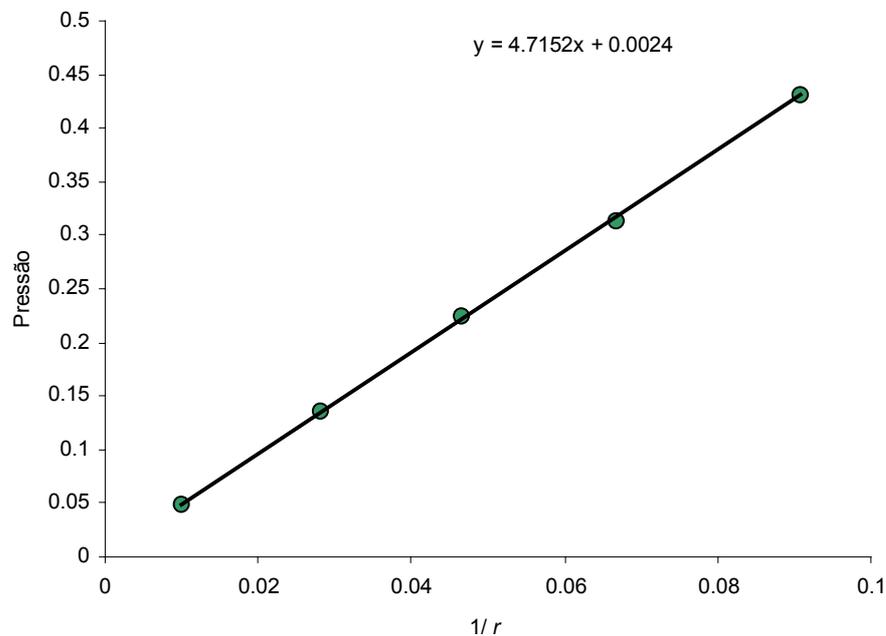


Figura 6.5.5 – Medida da tensão interfacial usando-se a Lei de Laplace, a reta é uma interpolação.

O valor analítico dado pela Eq. (5.1.b.33) para este caso prevê 4.832 para a tensão interfacial, o valor correspondente simulado na figura (6.5.3) é 4.855, o valor tirado da figura (6.5.5) é 4.715.

O procedimento anterior foi realizado para vários fatores de interação  $A$ , e o resultado é mostrado na figura (6.5.6).

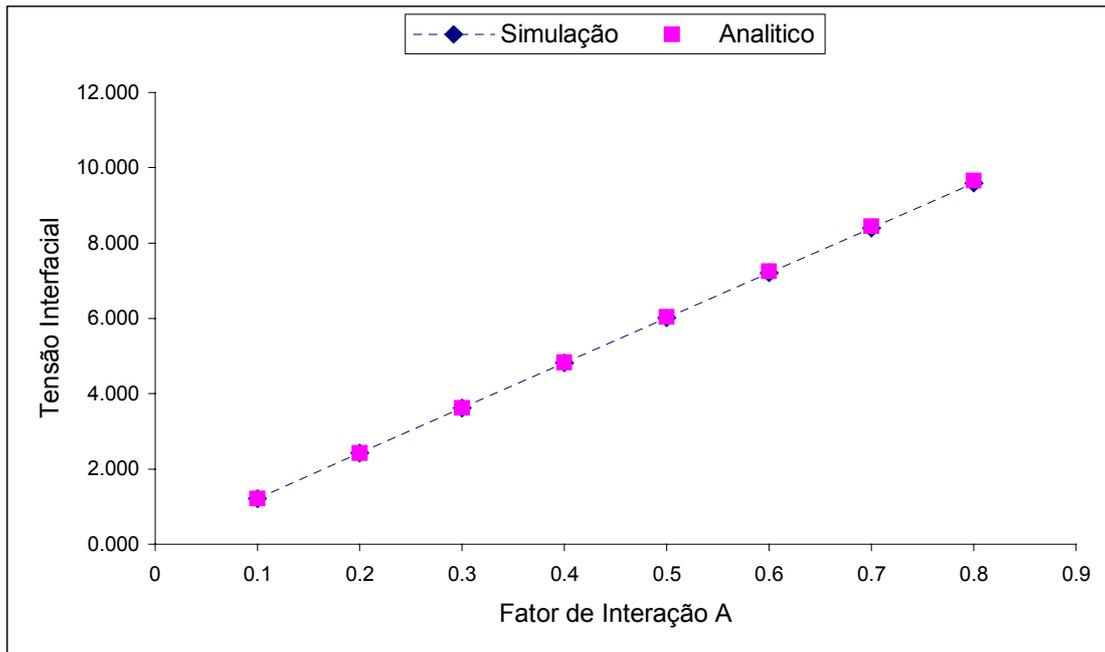


Figura 6.5.6 – Tensão interfacial para vários valores de  $A$ , usando-se a Lei de Laplace.

A expressão para a tensão interfacial, dada pela Eq. (5.1.b.33), vale para um fluido em repouso e para interface plana, embora a expressão completa, como sugere a Eq. (5.1.b.13), deva depender da velocidade do escoamento. Observa-se nesta seção que os valores simulados quando o fluido está em repouso, apresentando uma interface plana, concordam bastante com os valores dados pela Eq. (5.1.b.33), que por sua vez, concordam com valores de simulação para interfaces curvas.

## CONCLUSÃO

Com o objetivo de simular escoamentos bifásicos, para quando as viscosidades das fases possam ser diferentes e independentes da difusividade (de uma espécie na outra), foi desenvolvido um modelo de Boltzmann a três parâmetros de relaxação independentes. Este trabalho foi dividido em duas partes, uma que contempla fluidos totalmente miscíveis e outra que contempla fluidos parcialmente miscíveis, no qual existe uma interface de separação onde as fases coexistem. Na primeira parte, foram obtidas expressões analíticas para: a viscosidade de cada fase e para a difusividade da mistura; além disso, as equações de transporte de massa e de quantidade de movimento foram corretamente obtidas. Na segunda parte, foram obtidas expressões analíticas para: a viscosidade de cada fase, a difusividade na interface, a largura da interface, as pressões normal e tangencial na interface, a tensão interfacial; além disso, foram obtidas as equações de transporte da massa e da quantidade de movimento, a qual apresenta dois termos extras quando comparada com a equação de Navier-Stokes para fluidos newtonianos (escoamentos incompressíveis), devido às interações na região da interface. A expressão analítica para a tensão interfacial foi obtida fazendo-se uma análise da dinâmica do modelo na interface, exigindo-se que esta levasse ao anulamento da difusão nesta região. A tensão interfacial foi obtida para o caso do fluido estar em repouso e possuir uma interface plana e estável, quando existe velocidade de escoamento diferente de zero a análise se complica e aparecem efeitos que levam a quebra da invariância galileana. Comparações da tensão interfacial (interface plana e em repouso) com valores medidos numa simulação para interface curva em repouso está de acordo com a Lei de Laplace. Todas as expressões analíticas foram confirmadas nas simulações. O modelo satisfaz a equação de difusão e a equação de Navier-Stokes para fluidos newtonianos incompressíveis, quando é respeitado o limite de  $\frac{2b_m}{D}$  (capítulo 5) partículas em repouso. A largura da interface obtida é proporcional à distância entre os sítios e a tensão interfacial proporcional à intensidade da força aplicada.

A forma de análise, na expansão de Chapman-Enskog descrita nos capítulos 4 e 5, evitando-se usar a decomposição das derivadas temporais, mostrou-se bastante útil, pois, algumas versões do modelo apresentado no capítulo 3 foram assim rapidamente investigadas, além de esclarecer fisicamente o processo da expansão.

O modelo proposto deve ainda ser testado do ponto de vista de eficiência computacional, comparando-o com os modelos existentes.

Como evolução do modelo pode-se sugerir:

- i) estender o alcance dos mediadores para além de uma unidade de rede;
- ii) fazer com que uma partícula seja atraída por outra do mesmo tipo, independentemente do outro tipo de partícula estar presente ou não no sítio;
- iii) extensão do modelo para a interação sólido–fluido, possibilitando o estudo de problemas de ângulo de contato dinâmico.

Para finalizar, o modelo proposto, construído usando-se idéias de todos os outros anteriores, se apresenta como complementar a estes e contribui para uma melhor compreensão dos escoamentos de fluidos miscíveis e imiscíveis.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABE, T.; *J. Comp. Phys.* **131**, 241 (1997).

ALEXANDER, F. J.; CHEN S., GRUNAU, D. W. (1993). *Phys. Rev. B* **48**, 634.

ANGELOPOULOS, A. D.; PAUNOV, V. N.; BURGANOS, V. N.; PAYATAKES, A. C., 1998. *Phys. Rev. E* **57**, 3237.

CHEN, Y.; OHASH, H.; AKYAMA, M. (1994). *Phys. Rev. E* **50**, 2776-2783.

CHEN, H.; DOOLEN, G. (1995). “**Multicomponent Lattice-Boltzmann Model with Interparticle Interaction**”. *J. Stat. Phys.* **81**, 379-393.

D' HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P.; FRISCH, U. (1986) “**Lattice gas models for 3D hydrodynamics**” *Europhys. Lett.* **2**, 291-297.

FACIN, P. C.; SANTOS, L. O. E.; PHILIPPI, P. C., 2003. “**A non-linear lattice-boltzmann model for ideal miscible fluids**”. *Lecture Notes in Computer Science* (submetido).

FLEKΦY, E. G. (1993). “**Lattice Bhatnagar-Gross-Krook models for miscible fluids**”. *Phys. Rev. E* **47**, 4247-4257.

FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. (1986). “**Lattice-Gas Automata for Navier-Stokes Equation**” *Physical Review Letters* **56**, 1505-1508.

GROSFILS P, BOON JP, LALLEMAND, P., (1992). *Phys. Rev. Lett.* **68** (7), 1077-1080.

GUNSTENSEN, A. K.; ROTHMAN, D. H.; ZALESKI, S.; AND ZANETTI, G. (1991). “**A lattice-Boltzmann model of immiscible fluids**”. *Phys. Rev. A* **43**, 4320-4327.

HÁZI, G.; IMRE, ATTILA R.; MAYER, G.; FARKAS, I., 2002. *Annals of Nuclear Energy* **29**, 1421-1453.

HE, X.; LUO, L-S. *Phys. Rev. E* **55**, 6333 (1997).

HOLDYCH, D. J.; ROVAS, D.; GEORGIADIS, J. G.; BUCKINS, R. O., 1998. *Int. J. Mod. Phys.*, **9**, 1393.

INAMURO, T.; KONISHI, N.; OGINO F., 2000. *Computer Physics Communications* **129**, 32-45.

KALARAKIS, A.; BURGANOS, V.; PAYATAKES, A., 2003. *Physical Review E* **67**, 016702.

LUO, L. S., 1998. *Phys. Rev. Letters* **81**, 1618.

LUO, L. S.; GIRIMAJI, S. S.: “**Lattice Boltzmann model for binary mixtures**”. *Phys. Rev. E* **66**(3): art. No. 035301 (2002).

MARTYS, N. S.; CHEN, H., *Phys. Rev. E* **53** (1), 743 (1996).

MCNAMARA, G.; ALDER, B. (1993). *Physica A* **194**, 218-228.

MCNAMARA G. G.; VAND ZANETTI G. (1988). “**Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata**” *Physical Review Letters* **61**, 2332-2335.

ORLANDINI, E.; SWIFT, M. R.; YEOMANS, J. M., 1995. *Europhys. Lett.* **32**, 463.

QIAN, Y. H.; D’HUMIÈRES D.; LALLEMAND, P., 1992. “**Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation**” *Europhys. Lett.* **17**, 479-484.

ROTHMAN, D. H.; ZALESKI, S. (1997). **LATTICE-GAS CELLULAR AUTOMATA: SIMPLE MODELS OF COMPLEX HYDRODYNAMICS** (Cambridge University Press).

SANTOS, L. O. E.; PHILIPPI, P. C.; *Phys. Rev. E*, **65**(4), n<sup>o</sup> 046305 (2002).

SANTOS, L. O. E.; FACIN, P. C.; PHILIPPI, P. C., 2003. “**Lattice-Boltzmann model based on field mediators for immiscible fluids**”. *Phys. Rev. E* **68**, 056302 (2003).

SHAN, X., CHEN, H. (1993). *Physical Review E* **47**, 1815.

SHAN, X., CHEN, H. (1994). “**Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation**”. *Physical Review E* **49**, 2941-2948.

SOFONEA, V., SEKERKA, R. F., 2001. *Physica A* **299**, 494.

SWIFT, M. R., OSBORN, W. R., YEOMANS, J. M., 1995. *Phys. Rev. Letters* **75**, 830.

SWIFT, M. R., ORLANDINI, E., OSBORN, W. R., YEOMANS, J. M., 1996. *Phys. Rev. E* **54**, 5041.

**APENDICES**

**APÊNDICE I****A three-parameter non-linear Lattice-Boltzmann model for ideal miscible fluids**

(Artigo submetido à revista **Lecture Notes in Computer Science**, janeiro de 2003)

# A three-parameter non-linear lattice-Boltzmann model for ideal miscible fluids

Paulo Cesar Facin<sup>1</sup>, Paulo Cesar Philippi<sup>2</sup>, and  
Luís Orlando Emerich dos Santos<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Physics Department, State University of Ponta Grossa  
84030-900 Ponta Grossa, PR, Brazil  
facin@lmppt.ufsc.br

<sup>2</sup> Mechanical Engineering Department, Federal University of Santa Catarina,  
8804-900, Florianópolis, SC, Brazil  
{philippi, emerich}@lmppt.ufsc.br

**Abstract.** Present work is concerned with the construction of a lattice-Boltzmann (LB) model for ideal miscible fluids. In this particular case, collision term in LB equation can be modelled by, only, considering mutual and cross collisions between, respectively, particles of the same and of different kind. A non-linear LB model with three distinct relaxation times intended to be used in problems with large concentration gradients is presented. Model enables the independent management of the fluid viscosities  $\mu_r$  and  $\mu_b$  and binary diffusivity  $\mathcal{D}$ . It is shown that mass and momentum are, always, preserved and that the model retrieves consistent hydrodynamic equations in the incompressible limit. Theoretical values, obtained from Chapman-Enskog analysis, for binary diffusivity and mixture viscosity are compared with numerical values, directly obtained from LB simulations.

## 1 Introduction

When two fluids  $r$  and  $b$  are mixed, long-range intermolecular forces will control the nature of the resulting physical system. When attractive  $r$ - $r$  and  $b$ - $b$  forces are dominant with respect to  $r$ - $b$  forces, fluids  $r$  and  $b$  will segregate. In this case, fluids are said to be immiscible. Mixtures of fluids can be thermodynamically stable when long-range attraction between molecules of different kinds are dominant. In this second case, fluids are said to be miscible. When long-range forces are negligible, the fluids and their mixtures are said to be ideal.

A review on lattice-Boltzmann models (LB) for miscible fluids has been, recently, given by Sofonea and Sekerka[1]. Most common LB are based on a single BGK collision term and momentum conservation requires the relaxation times for the species  $k$  to be identical [2],[3],[4]. In this way, simulation is restricted to fluids with identical viscosity. Sofonea and Sekerka proposed the following splitting of the collision term,

$$\Omega_i^r = \left( \frac{\rho^r}{\tau^r} + \frac{\rho^b}{\tau^{rb}} \right) [R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}) - R_i] , \quad (1)$$

$$\Omega_i^b = \left( \frac{\rho^b}{\tau^b} + \frac{\rho^r}{\tau^{br}} \right) [B_i^{eq}(\rho^b, \mathbf{u}) - B_i] , \quad (2)$$

where, for fluids  $r$  and  $b$ ,  $\rho^r$ ,  $\rho^b$  are the densities, the  $\tau$ 's are relaxation times,  $R_i$ ,  $B_i$  are the distribution functions, and  $R_i^{eq}$ ,  $B_i^{eq}$  denotes the equilibrium distributions, calculated using the mixture velocity  $\mathbf{u}$ .

Momentum preservation requires

$$\left( \frac{\rho^r}{\tau^r} + \frac{\rho^b}{\tau^{rb}} \right) = \left( \frac{\rho^b}{\tau^b} + \frac{\rho^r}{\tau^{br}} \right) = \frac{1}{\tau} , \quad (3)$$

or  $\tau^{br} = \tau^r$  and  $\tau^{rb} = \tau^b$ . In this way, Sofonea and Sekerka's model use *two independent* relaxation times, replacing the constant relaxation time by a function of the fractional mass of  $r$  and  $b$  particles.

In this work, a three-parameter BGK model is presented for ideal miscible fluids, enabling the independent management of the mass diffusivity and  $r$  and  $b$  fluid viscosities.

Although in a different form, a three-parameter model with the same above features has been, very recently, proposed by Luo and Girimaji[5]. Luo and Gimaji's rapid communication was published in the course of present work and, in spite of the fact that a detailed comparison work is needed considering the computational performance of the two models, some comments are given in the Conclusions section, for clarifying some main differences that could be important.

## 2 Model

Considering  $R_i(\mathbf{X}, T)$  to be the particles distribution of  $r$ -particles in site  $\mathbf{X}$  at time  $T$  and, similarly, for  $B_i(\mathbf{X}, T)$ , lattice-Boltzmann equation for kind  $K$  particles,  $K = R, B$ , will be written as

$$K_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) = K_i(\mathbf{X}, T) + \Omega_i^k(R_0, R_1, \dots, R_{b_m}, B_0, B_1, \dots, B_{b_m}) , \quad (4)$$

where  $\mathbf{c}_i$  = lattice unitary velocity along direction  $i$ ,  $b_m$  = number of lattice directions and index 0 corresponds to rest particles. Collision operator  $\Omega_i^k$ ,  $k = r, b$  is required to satisfy mass and momentum conservation:

$$\sum_{i=0}^{b_m} \Omega_i^r = 0 , \quad (5)$$

$$\sum_{i=0}^{b_m} \Omega_i^b = 0 , \quad (6)$$

$$\sum_{i=0}^{b_m} (\Omega_i^r + \Omega_i^b) \mathbf{c}_i = 0 . \quad (7)$$

### A three-parameter non-linear lattice-Boltzmann model

A three-parameter BGK collision term that satisfies the above restrictions is proposed in present work, written as

$$\Omega_i^r = \omega^r \frac{R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}^r) - R_i}{\tau^r} + \omega^b \frac{R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}^b) - R_i}{\tau^m}, \quad (8)$$

$$\Omega_i^b = \omega^b \frac{B_i^{eq}(\rho^b, \mathbf{u}^b) - B_i}{\tau^b} + \omega^r \frac{B_i^{eq}(\rho^b, \mathbf{u}^r) - B_i}{\tau^m}, \quad (9)$$

where

$$\omega^k = \frac{\rho^k}{\rho}, \quad (10)$$

and

$$\rho^k = \sum_{i=0}^{b_m} K_i, \quad (11)$$

$$\mathbf{u}^k = \frac{1}{\rho^k} \sum_{i=0}^{b_m} K_i \mathbf{c}_i, \quad (12)$$

are, respectively, the macroscopic density and velocity of component  $k$ ,  $k = r, b$ . Equilibrium distributions are taken from the single-fluid  $\mathcal{O}(v^2)$  lattice-Boltzmann equilibrium distributions as[6],

$$K_i^0(\rho^k, \mathbf{v}) = \frac{\rho^k}{b} + \frac{D\rho^k}{b_m c^2} c_{i\alpha} v_\alpha + \frac{D(D+2)\rho^k}{2b_m c^4} c_{i\alpha} c_{i\beta} v_\alpha v_\beta - \frac{D\rho^k}{2b_m c^2} (v)^2, \quad i = 1 \dots b_m \quad (13)$$

$$K_0^0(\rho^k, \mathbf{v}) = \frac{\rho^k}{b} b_r - \frac{\rho^k}{c^2} (v)^2, \quad (14)$$

for a generic velocity  $\mathbf{v}$  and  $k = r, b$ . In the above equation, as usually,  $D$  is the lattice Euclidean dimension,  $c = |\mathbf{c}_i|$ ,  $b_r$  is a free-parameter related to the distribution of rest particles,  $b = b_r + b_m$ . The first term in the r.h.s. of Eq. (8) is related to the relaxation of  $r$ -particles distribution to an equilibrium state given by  $r$ -component density and velocity, considering  $r$ - $r$  collisions, only. The second term considers  $r$ - $b$  collisions and is related to the relaxation of  $r$ -particles to an equilibrium state given by density  $\rho^r$  and by a  $b$  velocity  $\mathbf{u}^b$ . When component  $b$  is dominant, i.e., when  $\rho^b/\rho \rightarrow 1$ , collisions  $r$ - $r$  are very infrequent and collisions  $r$ - $b$  will impose velocity  $\mathbf{u}^b$  to component  $r$ .

### 3 Chapman-Enskog asymptotic analysis

In the continuum limit,  $K_n = h/L \rightarrow 0$ , where  $h$  is the length corresponding to a lattice unit and  $L$  is a macroscopic length, distribution  $K_i(\mathbf{X}, T)$  is expanded in powers of  $K_n$ ,

$$K_i = K_i^0 + K_n K_i^1 + \dots, \quad K = R, B; \quad i = 0, 1, \dots, b_m, \quad (15)$$

and the time derivative has an induced decomposition

$$\partial_t = \partial_0 + K_n \partial_1 + \dots \quad (16)$$

Collision term given by Eq. (8) can be expanded around  $R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u})$ ,  $\mathbf{u} = \omega^r \mathbf{u}^r + \omega^b \mathbf{u}^b$ , giving

$$\begin{aligned} \Omega_i^r &= \left( \frac{\omega^r}{\tau^r} + \frac{\omega^b}{\tau^m} \right) [R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}) - R_i] + \\ &+ \frac{\omega^r}{\tau^r} \rho^r \frac{D}{b_m c^2} (\mathbf{u}^r - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{c}_i + \frac{\omega^b}{\tau^b} \rho^r \frac{D}{b_m c^2} (\mathbf{u}^b - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{O}(u^2). \end{aligned} \quad (17)$$

Writting lattice-Boltzmann equation, Eq. (4), in continuous variables, using a time scale  $\delta$  and the length scale  $h$  and using dimensionless variables  $t^* = t/t_c$ , where  $t_c$  is a macroscopic time,  $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}/L$ ,

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{K_n} \partial_{t^*} R_i + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i + \frac{1}{2} \frac{\epsilon^2}{K_n} \partial_{t^* t^*} R_i + \frac{1}{2} K_n c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha^* \beta^*} R_i + \\ + \epsilon c_{i\alpha} \partial_{t^*} \partial_{\alpha^*} R_i = \frac{1}{K_n} \left( \frac{\omega^r}{\tau^r} + \frac{\omega^b}{\tau^m} \right) [R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}) - R_i] + \\ + \frac{\omega^r}{\tau^r} \frac{D}{b_m c^2} \mathbf{j}^{r,1} \cdot \mathbf{c}_i + \frac{\omega^r}{\tau^m} \frac{\rho^r}{\rho^b} \frac{D}{b_m c^2} \mathbf{j}^{b,1} \cdot \mathbf{c}_i, \end{aligned} \quad (18)$$

where  $\epsilon = \delta/t_c$  and

$$\mathbf{j}^{k,1} = \sum_i K_i^1 \mathbf{c}_i, \quad (19)$$

is the  $K_n$  first order contribution to species  $K$  diffusive flux

$$\mathbf{j}^k = \rho^k (\mathbf{u}^k - \mathbf{u}) = K_n \mathbf{j}^{k,1} + K_n^2 \mathbf{j}^{k,2} + \dots \quad (20)$$

In Equation (18), the first term in the second member will be dominant when  $\epsilon \sim K_n \ll 1$  and the solution of

$$\left( \frac{\omega^r}{\tau^r} + \frac{\omega^b}{\tau^m} \right) [R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}) - R_i] = 0, \quad (21)$$

gives the zero-th order solution to  $R_i$ ,

$$R_i^0 = R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}). \quad (22)$$

Using the same reasoning for species  $b$ ,

$$B_i^0 = B_i^{eq}(\rho^b, \mathbf{u}). \quad (23)$$

In the first order,  $R_i^1$  is the solution of

$$\begin{aligned} & \frac{\epsilon}{K_n} \partial_{0^*} R_i + c_{i\alpha} \partial_{\alpha^*} R_i = \\ & \left( \frac{\omega^r}{\tau^r} + \frac{\omega^b}{\tau^m} \right) R_i^1 + \frac{\omega^r}{\tau^r} \frac{D}{b_m c^2} \mathbf{j}^{r,1} \cdot \mathbf{c}_i + \frac{\omega^r}{\tau^m} \frac{\rho^r}{\rho^b} \frac{D}{b_m c^2} \mathbf{j}^{b,1} \cdot \mathbf{c}_i, \end{aligned} \quad (24)$$

giving,

$$\begin{aligned} R_i^1 = & -\frac{\tau^r \tau^m}{\tau^r \omega^b + \tau^m \omega^r} \left\{ -\omega^r \frac{D}{b_m c^2} c_{i\alpha} j_{\alpha}^{r,1} \left( \frac{1}{\tau^r} - \frac{1}{\tau^m} \right) + \right. \\ & + \frac{1}{b} [-\partial_{\alpha}(\rho^r u_{\alpha}) + \omega^r u_{\alpha} \partial_{\alpha} \rho + (\partial_{\alpha} \rho^r - \omega^r \partial_{\alpha} \rho) c_{i\alpha}] + \\ & \left. + \left[ -\frac{D+2}{c^2} \omega^r u_{\beta} \partial_{\alpha} \rho + \frac{bD}{b_m c^2} + \frac{bD}{b_m c^2} (\partial_{\alpha}(\rho^r u_{\beta}) + u_{\beta} \partial_{\alpha} \rho^r) \right] c_{i\alpha} c_{i\beta}, \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

A similar expression can be obtained for  $B_i^1$ .

#### 4 Macroscopic equations in the continuum limit

Macroscopic equations were found by replacing the distributions  $R_i^1$  and  $B_i^1$  in the  $K_n$  expansion of Eq.(4). Mass conservation equation for the  $k$ -species is obtained by multiplying the resulting equation by 1 in the  $\mathbf{c}_i$ -space and by adding the  $K_n$  zero and first order contributions. At first order in  $K_n$ , species- $r$  mass conservation equation was recovered in the following form,

$$\partial_t \rho^r + \partial(\rho^r u_{\alpha}) + \partial_{\alpha} (j_{\alpha}^r) = 0, \quad (26)$$

where the  $r$ -species diffusive flux is given by

$$j_{\alpha}^r = -\rho D \partial_{\alpha} (\omega_r) = -\rho (\tau^m - 1/2) \frac{b_m c^2}{bD} \partial_{\alpha} (\omega_r), \quad (27)$$

in lattice units.

In this way, binary diffusivity depends, only, on the cross relaxation time and does not depend on the mass fraction of the  $r$  and  $b$  species. This result is consistent with Chapman-Enskog results, considering the first order  $\mathbf{c}$ -moments of Boltzmann continuous equation, when the mass  $m_r = m_b$  [7]. In fact, this restriction cancels the species diffusive flux dependence on pressure gradients.

Paulo Cesar Facin et al.

For the momentum equation, the lacking of energy conservation in present model restricts the analysis to the low-velocity, incompressible limit. In this case, after dropping-out the terms related to  $\nabla \cdot \mathbf{u}$ ,  $\mathcal{O}(u^2)$  and  $\mathcal{O}(\mathbf{j} \cdot \mathbf{u})$ , Chapman-Enskog analysis leads to

$$\partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha (P\delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) = \eta \partial_\alpha [\rho(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)] , \quad (28)$$

where  $P = \rho c_s^2$  and the kinematic viscosity coefficient  $\eta$ , in lattice units, is given by

$$\eta = \frac{c^2}{D+2} \left[ \frac{A+B}{2(\rho^r \tau^m + \rho^b \tau^r)(\rho^b \tau^m + \rho^r \tau^b)} \right] , \quad (29)$$

where  $A$  and  $B$  are shown below,

$$A = -\rho^r \rho^b (\tau^m)^2 - (\rho^r)^2 \tau^b \tau^m - (\rho^b)^2 \tau^r \tau^m - \rho^r \rho^b \tau^r \tau^b , \quad (30)$$

$$B = 2\rho^r \rho^b (\tau^m)^2 (\tau^r + \tau^b) + 2\tau^r \tau^b \tau^m [(\rho^r)^2 + (\rho^b)^2] . \quad (31)$$

In this way, in the incompressible limit, Navier-Stokes equation is correctly retrieved in this LB approximation. Mixture viscosity appears as a complex function of the three parameters,  $\tau^r$ ,  $\tau^b$ ,  $\tau^m$  and the mass fractions,  $\rho^r$ ,  $\rho^b$ . When  $\rho^b \rightarrow 0$ ,

$$\eta = \frac{c^2}{D+2} \left( \tau^r - \frac{1}{2} \right) , \quad (32)$$

which is the correct expression for the kinematic viscosity of pure component  $r$ .

## 5 Comparison between Theoretical Predictions and Simulation Results

Theoretical predictions Eqs.(27) and (29) were compared with simulation results. Simulated diffusivity values, shown in Table 1, were obtained using the transient method presented in Flekoy [8]. Simulation was performed using a 200 x 100 x 3, D3Q19 lattice, with a 10 particles/site for the particle density. Viscosity was obtained in a 400 x 20 x 3 lattice from the velocity profiles of a plane Poiseuille flow[9].

There is a very good agreement between theoretical predictions and simulation results even for markedely different relaxation times, although, as it was to be expected, large values of  $\tau$  and/or large differences in viscosity can, substantially, increase the simulation running time.

## 6 Conclusion

Intended to be used in diffusion-problems with large concentration gradients, in presently proposed model, relaxation times are non-linear functions of the  $r$  and

**Table 1.** Comparison between theoretical and simulated results

$\tau^r$	$\tau^b$	$\tau^m$	$\mathcal{D}$ theoretical	$\mathcal{D}$ simulated	$\eta$ theoretical	$\eta$ simulated
0.51	0.51	0.51	0.0033333	0.0033339	0.00333333	0.003467
0.51	0.8	0.9	0.1333333	0.1335	0.083020	0.086198
0.51	2.0	3	0.8333333	0.833984	0.378632	0.371125
1	1	1	0.166667	0.166669	0.166667	0.172615
1	3	1.5	0.3333333	0.331565	0.366667	0.370507
3	6	1.5	0.3333333	0.329481	0.566667	0.561238
1	3	3	0.8333333	0.81903	0.583333	0.559141

$b$  mass fractions. Previously, the following three-parameter linear BGK model was used

$$\Omega_i^k = \frac{K_i^{eq}(\rho^k, \mathbf{u}^k)}{\tau^k} + \frac{K_i^{eq}(\rho^k, \mathbf{u})}{\tau^m}, \quad (33)$$

with the same features of the model given by Eqs (8), (9). In this way, it preserves mass and momentum in collisions and gives a consistent hydrodynamics. Nevertheless, the use of constant relaxation times leads to constant mixture viscosity and this appear to be, only, realistic when concentration gradients are small. In present notation, Luo and Gimaji's model [5] can be written as

$$\Omega_i^r = \frac{R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}^r) - R_i}{\tau^r} + \frac{1}{\tau_m} \omega^b R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}^r) (\mathbf{c}_i - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{u}^r - \mathbf{u}^b). \quad (34)$$

Although the authors did not report their mixture viscosity, the use of a constant relaxation time for  $r$ - $r$  collisions appear to be unrealistic when concentration gradients are important. In addition, contribution of  $r$ - $b$  collisions to  $R_i$  distribution is considered in Luo and Gimaji's model to be, only, proportional to the first-order non equilibrium term  $(\mathbf{u}^r - \mathbf{u}^b)$ . This difference should reveals to be unimportant, considering the low-velocity limitations of both models. Nevertheless, as commented in the Introduction of present paper, a more detailed comparative analysis is needed, focusing, specially, the computational performance.

**Acknowledgements.** Authors are greatly indebted with CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento do Pessoal do Ensino Superior), CNPq (Brazilian Council of Scientific and Technological Development), ANP (Brazilian National Agency of Petroleum) and Finep (Fundação Nacional de Estudos e Pesquisas) for the financial support.

## References

1. Sofonea, V., Sekerka R. F.: BGK models for diffusion in isothermal binary fluid systems. *Physica A* **299** (2001) 494–520

Paulo Cesar Facin et al.

2. Shan, X., Chen, H.: Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. Rev. E* **47** (1993) 1815–1819
3. Martys, N. S., Chen, H.: Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E* **53** (1996) 743–750
4. Xu, K.: BGK-based scheme for multicomponent flow calculations, *J. Comput. Phys.* **134** (1997) 122–133
5. Luo, L. S., Girimaji, S. S.: Lattice Boltzmann model for binary mixtures *Phys. Rev. E* **66**(3): art. no. 035301 (2002)
6. Rothman, D. H., Zaleski, S.: *Lattice-gas cellular automata: simple models of complex hydrodynamics*. Cambridge University Press, United Kingdom (1997)
7. Philippi, P. C., Brun, R.: Kinetic modeling of polyatomic-gas mixtures. *Physica A* **105** (1981) 147–168
8. Flekkøy, E. G.: Lattice Bhatnagar-Gross-Krook models for miscible fluids *Phys. Rev. E* **47** (1993) 4247–4257
9. Kadanoff, L. P., McNamara, G. R., Zanetti, G.: A Poiseuille Viscometer for Lattice Gas Automata. *Complex Systems* **1** (1987) 791–803

## APÊNDICE II

**A Lattice-Boltzmann model based on field mediators for immiscible fluids**

(artigo submetido à revista **Phys. Rev. E**, janeiro de 2003)

# A lattice-Boltzmann model based on field mediators for immiscible fluids

L. O. E. Santos,<sup>1,\*</sup> P. C. Facin,<sup>2,†</sup> and P. C. Philippi<sup>1,‡</sup>

<sup>1</sup> *Mechanical Engineering Department,  
Federal University of Santa Catarina,  
88040-900, Florianópolis, SC, Brazil*

<sup>2</sup> *Physics Department, State University of Ponta Grossa,  
84030-900, Ponta Grossa, PR, Brazil*

(Dated: January 27, 2003)

## Abstract

In this paper, a lattice BGK model is proposed for immiscible fluids. Collision operator is decoupled considering mutual and cross collisions between lattice-particles, with three independent parameters related to the diffusivity and to the viscosity of each fluid. Field mediator's concept described by Santos and Philippi, in Phys. Rev. E 65, 046305 (2002), is extended to the framework of the lattice-Boltzmann equation and interference between mediators and particles is modelled by considering that there is a deviation in particles velocity, proportional to the mediators' distribution at the site. A Chapman-Enskog analysis was performed leading to theoretical predictions of the interfacial tension. These theoretical predictions are compared with simulation results.

## INTRODUCTION

Flow of immiscible fluids is, classically, treated by considering that the transition layer has a null thickness and by performing a momentum balance around this layer. At microscopic level, when two immiscible fluids  $r$  and  $b$  are mixed, the long-range attraction between the molecules of each fluid is the molecular mechanism promoting fluid segregation. Intermolecular forces may be of many different types, including electrostatic forces between permanent dipoles, induction forces between permanent dipoles and induced dipoles, dispersion forces between non-polar molecules and hydrogen bonds. In the transition region between the two fluids, a molecule is, predominantly, subjected to attractive fields from its own phase that acts as a potential barrier and gives rise to fluid-fluid interfacial tension. In addition, molecules that are found in this transition layer are subject to  $r$ - $b$  collisions that try to mix the two fluids and are responsible for  $r$ - $b$  diffusion. The thickness of transition layer is, consequently, controlled by the strength and length of long-range potentials and by cross collisions,  $r$ - $b$ .

Theoretical difficulty is strongly increased when these two fluids interact with a solid surface. In fact, the interfacial energies  $\zeta^{rs}$  and  $\zeta^{bs}$  between fluids  $r$  and  $b$  and the surface are the main macroscopic mechanisms governing interface advancing or receding on a solid surface. When interface advances or recedes along a solid surface, dynamic effects will change the contact angle  $\theta^{rb/s}$  with respect to its equilibrium value.

Due to the complexity of intermolecular forces and considering their important contribution in defining fluid-fluid and fluid-solid interaction, boolean lattice-gas and lattice Boltzmann appear to be very suitable as downscale methods that can improve the understanding of complex physical phenomena that are very difficult to describe at the hydrodynamic scale.

In this paper, the field mediators concept, described [1], is extended for Boltzmann models of immiscible fluids. Mediators are null-mass particles that are emitted from the lattice sites and which only action is to invert the momentum of lattice particles, simulating a long-range field. When a site  $\mathbf{X}$  can be considered as an attractive center for  $k$  particles,  $k = r, b$ , it will emit mediators of kind  $k$  that will be propagated to neighbor sites in the propagation step. Interference of  $k$ -mediators pull back to site  $\mathbf{X}$ ,  $k$ -particles moving away from  $\mathbf{X}$ . In this way, following very simple emission and interference rules, mediators try to simulate the effect of long-range forces in fluid separation. Particles of kind  $r$  in  $r$ - $b$  interface that are

thrown by collisions toward the  $b$ -phase will be pulled back to the  $r$ -phase when they found  $r$ -mediators in the same site and in the same direction, after propagation step. Mediators of kind  $k$  are emitted from a site  $\mathbf{X}$  with a probability  $P_e^k$  that is proportional to the mass fraction of  $k$ -particles in that site.

Gunstensen et al.[2] and Gunstensen and Rothman[3] are attributed to be the first who introduced immiscible fluids color based models in the frame of the lattice Boltzmann method. Nevertheless, the most popular two-phase flow model, based on a pseudo-potential function, was derived originally by Shan and Chen [4]. This method was later extended to three dimensions[5]. An important drawback in the above model is that it cannot be used for fluids with different viscosity [6].

In present work, immiscible fluids  $r$  and  $b$  are modelled by splitting BGK collision term, separately considering  $r$ - $r$  and  $r$ - $b$  collisions. In fact, it was, early, shown (see, e.g., Philippi and Brun[7]) that the collision term in Boltzmann continuous equation for fluid  $r$  can be splitted into a self,  $r$ - $r$  and a cross,  $r$ - $b$ , collision terms. In this way, in contrast with the previous models, viscosity coefficients  $\mu_r$  and  $\mu_b$  and binary diffusivity  $\mathcal{D}_{rb}$  can be independently managed using three independent relaxation times. Interfacial tension is retrieved by modifying  $r$ - $b$  collision term, introducing long-range forces in the transition layer through the use of field mediators. Mediators' action is restricted to the transition layer and ideal gas state equation is retrieved for each fluid, far from the interface. In this way, we limit ourselves to an athermal model and no attempt to describe phase transitions and their related effects will be given here. The first tentative to a two-phase thermodynamically consistent model was performed by Swift et al.[8],[9]. In spite of the fact that the development of the free-energy model was inspired by Cahn-Hilliard model, it was pointed out that the model cannot lead to correct energy transport[10] and, moreover, it is not Galilean invariant[11]. An invariant Galilean model based on the free-energy model was presented in[12] to simulate multiphase flows (*not multicomponent*) and deserves more studies.

## MODEL

In presently proposed model, considering two immiscible fluids  $r$  and  $b$ , long-range attraction between the particles of the same species is simulated by producing field mediators on the lattice-sites [1], just before propagation step. Considering  $R_i(\mathbf{X}, T)$  to be the particles

distribution of  $r$ -particles in site  $\mathbf{X}$  at time  $T$  and, similarly, for  $B_i(\mathbf{X}, T)$ , mediators are created just before propagation step, following

$$M_i^r(\mathbf{X}, T) = \alpha M_i^r(\mathbf{X}, T - 1) + \beta \frac{\sum_j R_j(\mathbf{X} - \mathbf{c}_i, T)}{\sum_j R_j(\mathbf{X} - \mathbf{c}_i, T) + \sum_j B_j(\mathbf{X} - \mathbf{c}_i, T)}, \quad (1)$$

where  $\alpha + \beta = 1$ .

The first term in the right hand side of the above equation is, in fact, a recurrence relation, since  $M_i^r(\mathbf{X}, T - 1)$  depends on  $M_i^r(\mathbf{X}, T - 2)$  and on  $K_j(\mathbf{X} - 2\mathbf{c}_i, T - 2)$ ,  $K = R, B$ , for all  $j$  neighbors sites around site  $\mathbf{X} - 2\mathbf{c}_i$ , through second order terms in  $\alpha$  and  $\beta$ . In this way,  $M_i^r$  at site  $\mathbf{X}$ , will be dependent on the next neighbors  $r$ -particles concentration through first order terms, on the second neighbors  $r$ -particles through second order terms and so on. When  $\alpha = 0$  (or  $\beta = 1$ ), mediators are created at site  $\mathbf{X}$ , with the solely information of the concentration of  $r$ -particles on next neighbors sites: mediators distribution related to the direction  $i$  will be given by the mass fraction of  $r$ -particles on site  $\mathbf{X} - \mathbf{c}_i$ , at time  $T - 1$ . In this case interaction length corresponds to 1 lattice-unit. By increasing  $\alpha$  with respect to  $\beta$ , interaction length can be, arbitrarily, increased.

Mediators are created at each site  $\mathbf{X}$  and propagated with the unitary lattice velocity  $\mathbf{c}_i$ . Interference of field mediators with lattice-particles is described in the following.

Lattice-Boltzmann equation for kind  $K$  particles, is written as

$$K_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) - K_i(\mathbf{X}, T) = \Omega(R_0, \dots, R_{b_m}, B_0, \dots, B_{b_m}), \quad (2)$$

for  $K = R, B$ . Collision operator  $\Omega_i^k$  is required to satisfy mass and momentum conservation

$$\sum_{i=0}^{b_m} \Omega_i^r R_i = 0, \quad (3)$$

$$\sum_{i=0}^{b_m} \Omega_i^r B_i = 0, \quad (4)$$

$$\sum_{i=0}^{b_m} \mathbf{c}_i (\Omega_i^r R_i + \Omega_i^r B_i) = 0. \quad (5)$$

A three-parameters BGK collision term that satisfies the above restrictions is proposed in present work, written as

$$\Omega_i^r = \left( \frac{\rho^r}{\rho} \right) \frac{R_i^{eq}(\rho^r, \mathbf{u}^r) - R_i}{\tau^r} + \left( \frac{\rho^b}{\rho} \right) \frac{R_i^{eq}(\rho^r, \vartheta^b) - R_i}{\tau^m}, \quad (6)$$

where

$$\rho^k = \sum_{i=0}^{b_m} K_i , \quad (7)$$

and

$$\mathbf{u}^k = \frac{1}{\rho^k} \sum_{i=1}^{b_m} K_i \mathbf{c}_i , \quad (8)$$

are, respectively, the macroscopic density and velocity of component  $k$ ,  $k = r, b$ .

The first term in the r.h.s. of Eq. 6 is related to the relaxation of  $r$ -particles distribution to an equilibrium state given by the  $r$ -component density and velocity, considering  $r$ - $r$  collisions, only. The second term considers  $r$ - $b$  collisions and is related to the relaxation of  $r$ -particles to an equilibrium state given by density  $\rho^r$  and by a  $b$  velocity

$$\vartheta^b = \mathbf{u}^b - A \hat{\mathbf{u}}^m , \quad (9)$$

modified by the action of  $r$ -mediators, present in the same site. Constant  $A$  is to be related to interfacial tension. For ideal miscible fluids,  $A = 0$  and this collision term will describe the relaxation of  $r$ -particles distribution to an equilibrium state given by  $\rho^r$  and  $\mathbf{u}^b$ , as a consequence of  $r$ - $b$  cross collisions. In immiscible fluids, Eq. 9 means that particles of kind  $r$  will be separated from  $b$ -particles by long-range attractive forces from  $r$ -phase. In the same way,

$$\vartheta^r = \mathbf{u}^r + A \hat{\mathbf{u}}^m . \quad (10)$$

Mediators velocity at site  $\mathbf{X}$  is given by

$$\mathbf{u}^m = \sum_{i=1}^{b_m} (M_i^r - M_i^b) \mathbf{c}_i , \quad (11)$$

pointing to the opposed direction from where mediators were propagated, i.e., to the  $r$ -phase.

In pure phases the interference between field mediators and lattice particles has null effect, as a consequence of the momentum conservation. In this way, far from the interface, pressure  $P^k$  is directly related to density  $\rho^k$  through the square of sound speed.

## INTERFACIAL TENSION

Consider  $R_i^*$ ,  $B_i^*$  to be *stationnary* distributions satisfying the equilibrium balance

$$R'_i = R_{-i} , \quad (12)$$

$$B'_i = B_{-i}, \quad (13)$$

where  $R'_i$  and  $B'_i$  are the post-collisional distributions.

Interfacial tension  $\sigma_{rb}$  was calculated, using,

$$\sigma_{rb} = \int_{-\infty}^{\infty} [\Pi_{yy}^*(y) - \Pi_{xx}^*(y)] dy, \quad (14)$$

where momentum fluxes are given by

$$\Pi_{yy}^* = \sum_i (R_i^* + B_i^*) c_{iy} c_{iy} = c_s^2 \rho + \rho A^2 a_r a_{r1} + \rho A^2 a_b a_{b1}, \quad (15)$$

$$\Pi_{xx}^* = \sum_i (R_i^* + B_i^*) c_{ix} c_{ix} = c_s^2 \rho, \quad (16)$$

and, denoting the red concentration  $\omega^r = \rho^r / \rho$ ,

$$a_r = \frac{\omega^r (\omega^r - 1)}{(\omega^r \tau^m + \tau^r - \omega^r \tau^r)(2\tau^m - 1)}, \quad (17)$$

$$a_b = \frac{\omega^r (\omega^r - 1)}{(\omega^r \tau^m + \tau^m - \omega^r \tau^b)(2\tau^m - 1)}, \quad (18)$$

$$a_{r1} = \frac{-\omega^r \tau^m + (\omega^r)^2 \tau^m - (\omega^r)^2 \tau^r + 2\omega^r \tau^r - 4\omega^r \tau^r \tau^m - \tau^r + 4\tau^r \tau^m - 4\tau^r (\tau^m)^2}{2\tau^m - 1}, \quad (19)$$

$$a_{b1} = \frac{-\omega^r \tau^m + (\omega^r)^2 \tau^m - (\omega^r)^2 \tau^b + 4\omega^r \tau^b \tau^m - 4\tau^b (\tau^m)^2}{2\tau^m - 1}. \quad (20)$$

A closed form expression for the interfacial tension is obtained, in terms of lattice-parameters and relaxation times

$$\sigma_{rb} = c_s^2 (\tau^m - 1/2) A \rho_{out} \int_0^1 (a_r a_{r1} + a_b a_{b1}) \frac{d\omega^r}{\omega^r (1 - \omega^r)}, \quad (21)$$

where  $\rho_{out}$  is the particles density outside the transition layer. The changing variables  $y \rightarrow \omega^r$  was possible imposing null mass flux through interface.

## COMPARISON BETWEEN THEORETICAL PREDICTION AND SIMULATION RESULTS

Numerical simulations were performed setting  $\alpha = 0$  and  $\beta = 1$  on a three-layer chamber, using a 100 x 100 x 3, D3Q19 lattice, starting from an initial fluid distribution where equal volumes of  $r$  and  $b$  fluids are distributed, respectively, on the left and right sides of

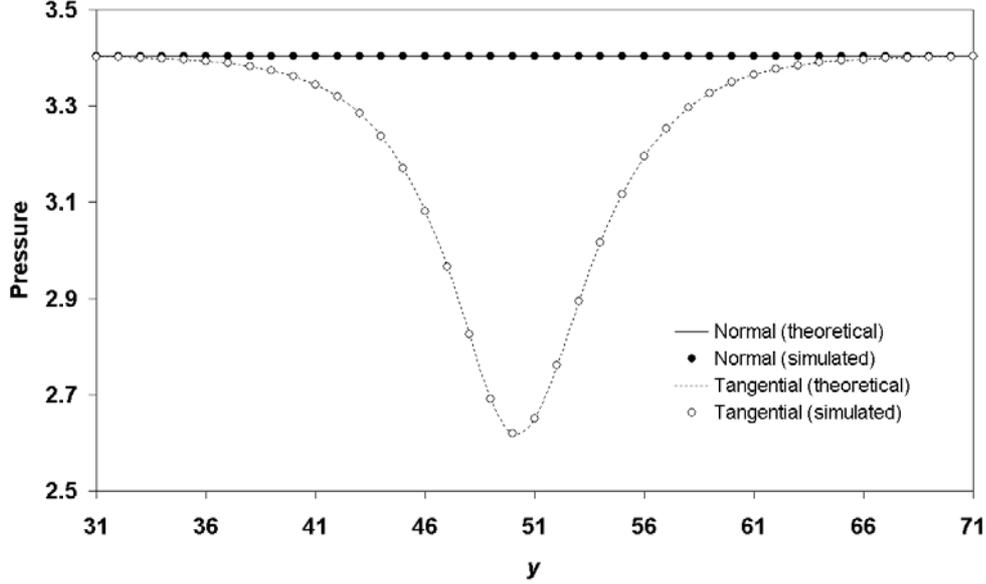


FIG. 1: Concentration distributions inside the transition layer.

the chamber. Periodic conditions were used for the upper and down and front and back chamber surfaces. Bounce-back conditions restricts fluid velocity to zero at the left and right chamber surfaces. At  $t = 0$  long-range forces are applied and simulation starts.

Figure 1 shows the pressure distribution inside the transition layer, calculated using Eqs. 15 and 16, and measured after simulation has reached the equilibrium. Simulation parameters are  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1$ ,  $\tau^r = 1$ ,  $\tau^b = 1$ ,  $\tau^m = 2$ ,  $A = 0.5$ . Normal and tangential pressures are found by measuring the momentum exchanged between the lattice-particles and a surface placed, respectively, at vertical (normal to  $y$ ) and horizontal position, for each point along the median line crossing the interface. Agreement between theoretical and simulated values is excellent. In the transition layer, pressure deviates from ideal gas law, i.e.,  $P = c_s^2 \rho$ , from a positive factor that is proportional to the long-range intensity factor  $A$  (see Eq. 15) and, for each  $y$  inside the transition layer, this factor is the difference between the full black and the trace lines shown in Figure 1.

Figure 2 gives a comparison between theoretical prediction, Eq. (14) and simulated results for the interfacial tension. Simulated results were obtained by adding all the contributions to normal pressure deviation across the interface. When, collision parameters  $\tau$  are kept constant, simulation shows a linear dependence of  $\sigma_{rb}$  with respect to  $A$ . This linear behavior is, also, followed by theoretical predictions.

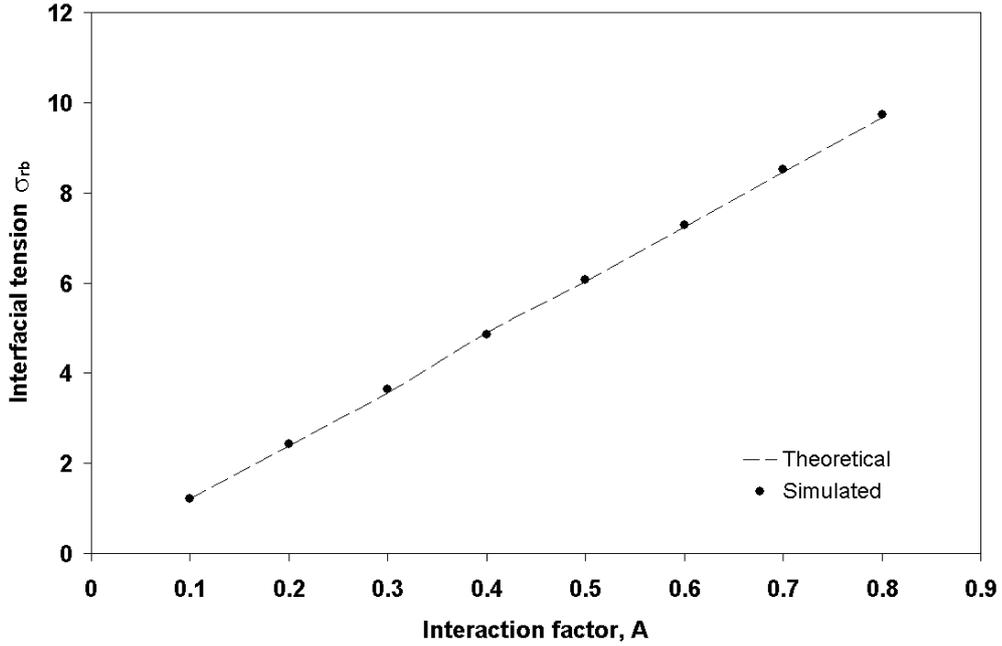


FIG. 2: Comparison between theoretical predictions and simulated results for  $\sigma_{rb}$ .  $\tau^r = 1$ ,  $\tau^b = 3$ ,  $\tau^m = 1.5$

## CONCLUSION

In present paper, a lattice-Boltzmann model is proposed for immiscible fluids. Collision term is split, taking mutual and cross collisions into account Long-range forces are simulated by using field mediators. Simulation results and theoretical predictions compare well for all long-range intensity factor values that were used.

This work was supported by CNPq (Brazilian Council of Scientific and Technological Development), ANP (Brazilian National Agency of Petroleum) and Finep (Fundação Nacional de Estudos e Pesquisas).

---

\* emerich@lmpt.ufsc.br

† facin@lmpt.ufsc.br

‡ philippi@lmpt.ufsc.br

[1] L. O. E. dos Santos and P. C. Philippi, Phys. Rev. E **65**, 046305 (2002).

[2] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski, and G. Zanetti, Phys. Rev. A. **43**, 4320 (1991).

- [3] A. K. Gunstensen and D. H. Rothman, *Europhys. Lett.* **18** (2bis), 157 (1992).
- [4] X. Shan and H. Chen, *Phys. Rev. E* **47**(3), 1815 (1993).
- [5] N. S. Martys and H. Chen, *Phys. Rev. E* **53** (1), 743 (1996).
- [6] G. Házi, A. R. Imre, G. Mayer, and I. Farkas, *Annals of Nuclear Energy* **29**, 1421 (2002).
- [7] P. C. Philippi and R. Brun, *Physica A* **105** (1-2), 147 (1981).
- [8] M. R. Swift, W. R. Osborn, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 830 (1995).
- [9] M. R. Swift, E. Orlandini, W. R. Osborn, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. E* **54**, 5041 (1996).
- [10] L.-S. Luo, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1618 (1998).
- [11] A. D. Angelopoulos, V. N. Paunov, V. N. Burganos, and A. C. Payatakes, *Phys. Rev. E* **57**, 3237 (1998).
- [12] T. Inamuro, N. Konishi, and F. Ogino, *Comp. Phys. Commun.* **129** 32 (2000)